

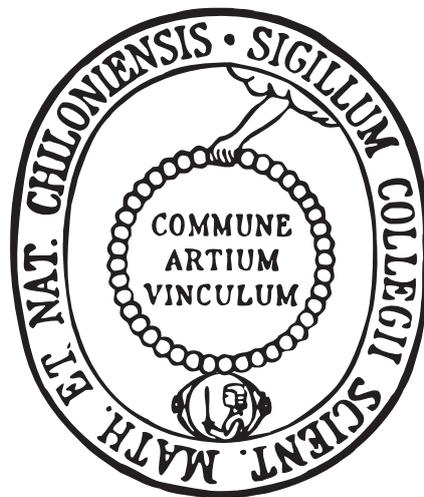
CHRISTIAN-ALBRECHTS UNIVERSITÄT ZU KIEL  
INSTITUT FÜR THEORETISCHE UND ASTROPHYSIK

Bachelorarbeit

# Quanten-Monte-Carlo entarteter, korrelierter Fermionen in Besetzungszahldarstellung

SIMON GROTH

KIEL, JUNI 2011



Referent:

Prof. Dr. Michael Bonitz

Erster Korreferent:

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Besetzungszahldarstellung . . . . .	3
2.2	Dichteoperator . . . . .	6
2.3	Ensembletheorie . . . . .	8
2.3.1	Mikrokanonische Verteilung . . . . .	8
2.3.2	Großkanonische Verteilung . . . . .	9
2.3.3	Gültigkeit der großkanonischen Beschreibung . . . . .	12
2.4	Ideales System . . . . .	13
2.5	System mit Wechselwirkung . . . . .	15
2.5.1	Diagonalnäherung . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Monte-Carlo</b>	<b>19</b>
3.1	Metropolisalgorithmus . . . . .	19
3.2	Testsystem . . . . .	21
3.3	Metropolis-Algorithmus für das Testsystem . . . . .	22
3.3.1	Monte-Carlo-Schritte . . . . .	22
<b>4</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>27</b>
4.1	Begründung der Monte-Carlo-Schritte . . . . .	27
4.2	Schalenaufbau . . . . .	33
4.3	Ergebnisse für das ideale System . . . . .	37
4.4	Ergebnisse für das wechselwirkende System . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>51</b>



# 1 Einleitung

Die Berechnung thermodynamischer Erwartungswerte von wechselwirkenden Vielteilchensystemen mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Methoden hat sich in den letzten Jahren, nicht zuletzt auf Grund der immer größer werdenden Rechenleistung, als sehr effizient erwiesen. So sind die berechneten Ergebnisse für sehr große, bosonische Vielteilchensysteme praktisch exakt [1, 2]. Bei wechselwirkenden, stark entarteten Fermionen tritt jedoch das sogenannte Fermionen-Vorzeichen-Problem auf, dessen Ursache die Antisymmetrie der Wellenfunktionen ist. Diese Antisymmetrie erzeugt ein wechselndes Vorzeichen der Terme, aus denen die Erwartungswerte berechnet werden [3]. Dies führt dazu, dass der Rechenaufwand exponentiell mit der Teilchenzahl wächst. Es existieren zwar diverse Methoden dieses Problem zu reduzieren, eine zufriedenstellende Lösung bleibt allerdings aus.

Ein neuer, viel versprechender Ansatz ist durch das Pfad-Integral-Monte-Carlo in Besetzungszahldarstellung (CPIMC) der zweiten Quantisierung gegeben, welches erst kürzlich in der Diplomarbeit von Tim Schoof [4] für wechselwirkende, fermionische Vielteilchensysteme entwickelt und in einer Dimension untersucht wurde. Dabei stellte sich heraus, dass diese Methode gerade für schwache Kopplung der Fermionen sehr effizient ist, wo alternative Methoden wie direktes Pfad-Integral-Monte-Carlo (DPIMC) versagen.

Ziel dieser Arbeit ist ein erster Test dieser neuen Methode in zwei Dimensionen, allerdings im Rahmen einer Diagonalnäherung des Wechselwirkungsoperators. Dies stellt zwar eine starke Vereinfachung des Problems dar, ermöglicht aber ein einfacheres Analysieren der beim Wechsel von einer auf zwei Dimensionen auftretenden Schwierigkeiten, was für spätere Rechnungen mit voller Wechselwirkung nötig ist.

Als Testsystem werden wechselwirkende Fermionen in einer zweidimensionalen, harmonischen Falle betrachtet, für das die thermodynamischen Erwartungswerte im idealen Fall aus der Theorie bekannt sind.

Die Arbeit ist so aufgebaut, dass im ersten Kapitel eine kurze Einführung in die theoretischen Grundlagen der Thermodynamik von Fermionen in Besetzungszahldarstellung gegeben wird, wobei auch die Gültigkeit des Formalismus für kleine Systeme diskutiert wird. Am Ende des Kapitels wird dann die Diagonalnäherung des Wechselwirkungsoperators durchgeführt. Anschließend soll im zweiten Kapitel das Monte-Carlo-Verfahren zunächst allgemein erläutert werden. Danach wird das Testsystem und die für dieses System entwickelten Monte-Carlo-Schritte beschrieben. Schließlich wird im dritten und letzten Kapitel eine detaillierte Begründung für die verwendeten Schritte gegeben und die Simulationsergebnisse aufgezeigt sowie

## *1 Einleitung*

diskutiert.

Für diese Arbeit wurde mir das C++ Programm von Tim Schoof, welches die Implementierung des Algorithmus für die exakte Rechnung in einer Dimension beinhaltet, bereitgestellt. Dieses wurde von mir an den entsprechenden Stellen verändert.

## 2 Theorie

In diesem Kapitel sollen die theoretischen Grundlagen, die für das Verständnis der Arbeit nötig sind, gegeben werden. Dazu wird als erstes das Konzept der Besetzungszahldarstellung erläutert, da alle weiteren Rechnungen in dieser durchgeführt werden.

Eine zentrale Größe für die Behandlung von Vielteilchensystemen ist der Dichteoperator, welcher im zweiten Abschnitt eingeführt wird.

Danach folgt eine gründliche Herleitung des großkanonischen Ensembles mit anschließender Diskussion bezüglich der Gültigkeit ihrer Anwendung auf mesoskopische Systeme. Zudem werden die wichtigen Zusammenhänge zur Berechnung der thermodynamischen Erwartungswerte bereitgestellt. Als nächstes werden die analytischen Ergebnisse eines idealen Systems von Fermionen angegeben, um dann schließlich die in dieser Arbeit verwendete Diagonalnäherung der Wechselwirkung durchzuführen.

Die ersten Abschnitte und die Behandlung des idealen Systems basieren auf der Lehrbuchreihe von Schwabl ([5, 6, 7]). Der Ableitung des großkanonischen Ensembles liegt die Vorlesung von Prof. M. Bonitz zu Grunde.

### 2.1 Besetzungszahldarstellung

Für  $N$  nicht wechselwirkende Fermionen ist der Hamiltonoperator gegeben durch

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hat{h}_j \quad (2.1.1)$$
$$\hat{h}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \hat{v}_j$$

wobei  $\hat{h}_j$  der Einteilchenhamiltonoperator ist, der sich zusammensetzt aus dem Operator der kinetischen Energie  $\hat{p}_j$  und dem Operator der potentiellen Energie  $\hat{v}_j$ . Es seien die Einteilcheneigenzustände und Eigenwerte bekannt:

$$\hat{h}_i |i\rangle = \epsilon_i |i\rangle \quad (2.1.2)$$

Hierbei bilden die  $|i\rangle$  ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) im Einteilchenhilbertraum  $\mathcal{H}_1$ . Wegen des Zerfallens des Hamiltonoperators in die Summe aus Einteilchenhamiltonoperatoren lässt sich der  $N$ -Teilchenzustand als Produktzustand

## 2 Theorie

aus Einteilchenzuständen schreiben:

$$|i_1 i_2 \dots i_N\rangle = |i_1\rangle_1 |i_2\rangle_2 \dots |i_N\rangle_N \quad (2.1.3)$$

Nun bilden die N-Teilchenzustände ein VONS im N-Teilchenhilbertraum  $\mathcal{H}^N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$  und die Schreibweise bedeutet, dass das Teilchen N sich im Zustand  $|i_N\rangle$  befindet.

An dieser Stelle wird nun der unitäre Paarvertauschungsoperator  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  eingeführt, der wie folgt auf einen N-Teilchenzustand wirkt:

$$\hat{\mathcal{P}}_{ij} |i_1 \dots i_i \dots i_j \dots i_N\rangle = |i_1 \dots i_j \dots i_i \dots i_N\rangle$$

Offenbar ist  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}^2 = 1$  und somit hat  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  die Eigenwerte  $\pm 1$ . Die Gruppe  $S_N$  aller Permutationen  $\hat{\mathcal{P}}$  besteht aus  $N!$  Elementen, wobei jedes Element durch Nacheinanderausführungen von Paarvertauschungen dargestellt werden kann. Ein Element heißt gerade (ungerade), wenn die Zahl der Paarvertauschungen gerade (ungerade) ist. Da alle physikalischen Operatoren  $\hat{O}(1, 2, \dots, N)$  symmetrisch sind, d.h. invariant unter Teilchenvertauschung, bedeutet dies:

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{O}] = 0$$

also

$$\langle \hat{\mathcal{P}}\psi_i | \hat{O} | \hat{\mathcal{P}}\psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{O} \hat{\mathcal{P}} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{P}} \hat{O} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{O} | \psi_j \rangle \quad (2.1.4)$$

Wobei  $|\psi_i\rangle$  ein beliebiger Vielteilchenzustand und  $|\hat{\mathcal{P}}\psi_i\rangle$  ein permutierter Vielteilchenzustand ist. Wegen (2.1.4) sind diese Zustände physikalisch gleichwertig, was auch als Ununterscheidbarkeit von Teilchen interpretiert wird. Die Erfahrung sagt uns jedoch, dass nur solche Zustände realisiert werden, die total symmetrisch oder total antisymmetrisch unter Paarvertauschung sind:

$$|i_1 \dots i_i \dots i_j \dots i_N\rangle_{\pm} = \pm |i_1 \dots i_j \dots i_i \dots i_N\rangle$$

Teilchen mit symmetrischen Zuständen heißen Bosonen (oberes Vorzeichen) und Teilchen mit antisymmetrischen Zuständen heißen Fermionen. Der N-Teilchenzustand ist dann eine Superposition aus allen  $N!$  permutierten Produktzuständen (2.1.3) mit dem entsprechenden Vorzeichen der Teilchensorte:

$$|i_1 i_2 \dots i_N\rangle_{\pm} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\hat{\mathcal{P}}} (\pm 1)^P \hat{\mathcal{P}} |i_1\rangle_1 |i_2\rangle_2 \dots |i_N\rangle_N \quad (2.1.5)$$

Hierbei bezeichnet  $P$  die Anzahl der Paarvertauschungen in  $\hat{\mathcal{P}}$  und  $\mathcal{N}$  den Normierungsfaktor:

$$\mathcal{N} = \begin{cases} \sqrt{N! \prod_{j=0}^{\infty} n_j}, & \text{für Bosonen} \\ \sqrt{N!}, & \text{für Fermionen} \end{cases}$$

## 2.1 Besetzungszahldarstellung

Wobei  $n_j$  die Häufigkeit des Zustands  $|j\rangle$  in dem Produktzustand (2.1.3) bezeichnet. Glg.(2.1.5) für Fermionen<sup>1</sup> ist gerade die Definition der Determinante:

$$|i_1 i_2 \dots i_N\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |i_1\rangle_1 & |i_1\rangle_2 & \dots & |i_1\rangle_N \\ |i_2\rangle_1 & |i_2\rangle_2 & \dots & |i_2\rangle_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |i_N\rangle_1 & |i_N\rangle_2 & \dots & |i_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

Sie heißt *Slater-Determinante* und man sieht sofort, dass sie Null wird, wenn gleiche Einteilchenzustände  $|i_j\rangle$  auftreten. Zwei Fermionen können also nicht im gleichen Zustand sein, was gerade dem Pauli-Prinzip entspricht. In dem antisymmetrisierten Zustand (2.1.5) ist keine Information mehr darüber enthalten, welches Teilchen in welchem Zustand ist, weshalb der Zustand allein durch die Besetzungszahlen  $n_j$ , d.h. die Anzahl der Teilchen im Zustand  $|j\rangle$ , definiert wird:

$$|i_1 i_2 \dots i_N\rangle_- = |n_0 n_1 \dots\rangle =: |\{n\}\rangle \quad (2.1.6)$$

mit

$$n_j = \{0, 1\} \quad \text{für Fermionen}$$

Dabei ist die Gesamtteilchenzahl  $N$  natürlich durch  $\sum_{j=0}^{\infty} n_j$  gegeben, diese soll ab jetzt aber nicht mehr fest sein, was einem Übergang zu einem System mit variabler Teilchenzahl entspricht. Die mit (2.1.6) definierten Vielteilchenzustände bilden dann ein VONS im sogenannten *Fock-Raum*  $\mathcal{F}_- := \mathcal{H}^0 \oplus \mathcal{H}^1 \oplus \mathcal{H}^2 \dots \oplus \mathcal{H}^N$ , der die *direkte Summe* der Hilberträume mit  $0, 1, 2, \dots$  Teilchen und ausschließlich antisymmetrischen Zuständen<sup>2</sup> darstellt. Es gilt also:

$$\sum_{\{n\}} |n_0 n_1 \dots\rangle \langle n_0 n_1 \dots| = \hat{1} \quad \text{mit} \quad \sum_{\{n\}} := \sum_{n_0=0}^1 \sum_{n_1=0}^1 \dots$$

und

$$\langle n_0 n_1 \dots | \bar{n}_0 \bar{n}_1 \dots \rangle = \langle \{n\} | \{\bar{n}\} \rangle = \delta_{n_0 \bar{n}_0} \delta_{n_1 \bar{n}_1} \dots =: \delta_{\{n\} \{\bar{n}\}}$$

Die Besetzungszahl  $n_j$  ist außerdem Eigenwert des Besetzungszahlenoperators  $\hat{n}_j$ , der über die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definiert ist, hier aber nicht abgeleitet wird. Es folgt der Zusammenhang:

$$\hat{n}_j |n_0 n_1 \dots n_j \dots\rangle = n_j |n_0 n_1 \dots n_j \dots\rangle$$

---

<sup>1</sup>Von jetzt an werden nur noch Fermionen betrachtet, da diese Bestandteil der Arbeit sind.

<sup>2</sup>im Fall von Fermionen

## 2 Theorie

Daraus ergibt sich der Teilchenzahloperator zu

$$\hat{N} |n_0 n_1 \dots\rangle := \sum_{j=0}^{\infty} \hat{n}_j |n_0 n_1 \dots\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} n_j |n_0 n_1 \dots\rangle = N |n_0 n_1 \dots\rangle \quad (2.1.7)$$

Unter den Voraussetzungen von (2.1.1) und (2.1.2) gilt für den Hamiltonoperator:

$$\hat{H} |n_0 n_1 \dots\rangle := \sum_j \epsilon_j \hat{n}_j |n_0 n_1 \dots\rangle = \sum_j \epsilon_j n_j |n_0 n_1 \dots\rangle = E |n_0 n_1 \dots\rangle \quad (2.1.8)$$

Über die Darstellung der Zweiteilchenoperatoren durch Erzeuger und Vernichter lassen sich speziell für den Paarwechselwirkungsoperator die *Slater-Condon-Regeln* ableiten, die die Matrixelemente in der Basis der N-Teilchenzustände  $|\{n\}\rangle$  festlegen (siehe [4]):

$$\langle \{n\} | \hat{W} | \{\bar{n}\} \rangle = \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=i+1}^{\infty} w_{ijij}^- n_i n_j, & \{n\} = \{\bar{n}\} \\ \sum_{i \neq p,q} w_{ipiq}^- (-1)^{\sum_{l=\min(p,q)+1}^{\max(p,q)-1} n_l} n_i, & \{n\} = \{\bar{n}\}_q^p \\ w_{pqrs}^- (-1)^{\sum_{l=p}^{q-1} n_l + \sum_{l=r}^{s-1} \bar{n}_l}, & \{n\} = \{\bar{n}\}_{r<s}^{p<q} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.1.9)$$

Mit  $|\{n\}_q^p\rangle$  wird der Zustand bezeichnet, der aus  $|\{n\}\rangle$  hervorgeht, wenn man die Besetzungszahlen  $n_q$  um eins erniedrigt und  $n_p$  um eins erhöht. Weiter ist  $|\{n\}_{r<s}^{p<q}\rangle$  so definiert, dass dieser aus  $|\{n\}\rangle$  hervorgeht, wenn man  $n_q$  und  $n_p$  um eins erhöht und  $n_r$  und  $n_s$  um eins erniedrigt, wobei  $p < q$  und  $r < s$  gilt:

$$|\{n\}_{r<s}^{p<q}\rangle = |\dots n_p + 1 \dots n_q + 1 \dots n_r - 1 \dots n_s - 1\rangle$$

In 2.1.9 werden die  $w_{ijkl}^- := w_{ijkl} - w_{ijlk}$  als antisymmetrisierte Zweiteilchenintegrale bezeichnet, wobei die  $w_{ijkl}$  die Zweiteilchenintegrale darstellen und sich im Ortsraum mit den Energieeigenzuständen  $\Phi_i(\vec{r})$  und der Wechselwirkung  $w(\vec{r}, \vec{r}')$  wie folgt berechnen lassen:

$$w_{ijkl} = \int d^3 r \int d^3 r' \Phi_i(\vec{r})^* \Phi_j(\vec{r}')^* w(\vec{r}, \vec{r}') \Phi_k(\vec{r}) \Phi_l(\vec{r}') \quad (2.1.10)$$

## 2.2 Dichteoperator

Sei  $\{|n\rangle\}$  ein vollständiges Orthonormalsystem von Vielteilchenzuständen. Dann ist ein reiner Systemzustand  $|\psi^i\rangle$  gegeben durch eine kohärente Überlagerung der Basiszustände  $|n\rangle$ :

$$|\psi^i\rangle = \sum_n c_j^i |n\rangle \quad c_j^i = \langle n | \psi^i \rangle$$

Im Allgemeinen besteht ein Systemzustand  $|\psi\rangle$  jedoch aus einer inkohärenten Überlagerung von reinen Zuständen  $|\psi^i\rangle$ , die mit einer Wahrscheinlichkeit  $P_i$  realisiert werden. Dieser Zustand wird als Gemisch oder Ensemble bezeichnet:

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{P_i} |\psi^i\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_{P_i} = 1 \quad (2.2.1)$$

Der Erwartungswert eines Operators  $\hat{O}$  wird also zu:

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \sum_i P_i \langle \psi^i | \hat{O} | \psi^i \rangle$$

oder mit der Einführung des Dichteoperators

$$\hat{\rho} := \sum_i P_i |\psi^i\rangle \langle \psi^i|$$

zu

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}) = \sum_n \langle n | \hat{O} \hat{\rho} | n \rangle$$

Hierbei kann die Spur in einer beliebigen Basis ausgeführt werden. Der Dichteoperator enthält somit alle Informationen über das System und ist deshalb von überragender Bedeutung in der statistischen Physik. Er besitzt folgende wichtige Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\hat{\rho} &= 1 \quad \text{wegen (2.2.1)} \\ \hat{\rho}^\dagger &= \hat{\rho} \\ \hat{\rho} &\text{ ist pos. semidefinit} \end{aligned}$$

Die Zeitentwicklung des Dichteoperators wird durch die Von-Neumann-Gleichung beschrieben:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)]\hat{\rho} \quad (2.2.2)$$

Wenn sich ein System im thermodynamischen Gleichgewicht<sup>3</sup> befindet, dann ist  $\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = 0$  und wegen (2.2.2) besitzen  $\hat{H}$  und  $\hat{\rho}$  gemeinsame Eigenzustände. Der Dichteoperator ist also diagonal in der Basis der Energieeigenzustände des Hamiltonoperators:

$$\begin{aligned} \hat{H} |i\rangle &= E_i |i\rangle \\ \Rightarrow \langle i | \hat{\rho} | i' \rangle &= P_i \delta_{i,i'} \\ \sum_{P_i} &= 1 \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

---

<sup>3</sup>Dies ist hier immer der Fall

Die Diagonalelemente  $P_i$  geben nun die Wahrscheinlichkeit für die Realisierung des Energieeigenzustandes  $|i\rangle$  im Ensemble an. Zudem hängt der Dichteoperator bzw. die Dichtematrix hier nur von Erhaltungsgrößen und eventuellen externen Parametern ab.

## 2.3 Ensembletheorie

Da zur Beschreibung des Modellsystems in dieser Arbeit das großkanonische Ensemble verwendet wird, soll dieses im folgenden Abschnitt aus der mikrokanonischen Verteilung quantenmechanisch hergeleitet werden, um dabei die verwendeten Näherungen aufzuzeigen. Anschließend wird dann die Gültigkeit dieser Theorie bezüglich der Anwendung auf mesoskopische Systeme, wie sie in dieser Arbeit vorliegen, diskutiert.

### 2.3.1 Mikrokanonische Verteilung

Das mikrokanonische Ensemble ist dadurch definiert, dass die Gesamtenergie bzw. innere Energie  $U$ , die Teilchenzahl  $\bar{N}$  sowie das Volumen  $V$  fixiert sind, es beschreibt also ein isoliertes System im Gleichgewicht. Der Ableitung liegt die Annahme der Gleichwahrscheinlichkeit aller Zustände mit Energie  $E_i$  in dem kleinen Intervall  $[U, U + \delta U]$  zu Grunde. Die Wahrscheinlichkeit  $P_i$  aus Glg. (2.2.3) ist dann:

$$P_i^{Mik}(U, V, \bar{N}) = \frac{1}{Z^{Mik}(U, V, \bar{N})} \Delta[U - E_i(V, \bar{N})]$$

$$\Delta[x] := \begin{cases} 1, & \text{für } x \in [0, 0 + \delta x] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$Z^{Mik}$  heißt mikrokanonische Zustandssumme und wird durch die Bedingung  $\sum_i P_i = 1$  bestimmt:

$$Z^{Mik}(U, V, \bar{N}) = \sum_i \Delta[U - E_i(V, \bar{N})] = \sum_{E_i \in [U, U + \delta U]} 1$$

Mit (2.2.3) ergeben sich die Matrixelemente der mikrokanonischen Dichtematrix zu:

$$\langle i | \hat{\rho}^{Mik}(U, V, \bar{N}) | i' \rangle = P_i^{Mik}(U, V, \bar{N}) \delta_{i,i'} =: \rho_i^{Mik} \delta_{i,i'}$$

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass  $Z^{Mik}$  von der Wahl der Größe  $\delta U$  für große Teilchenzahlen i.a. nicht abhängt<sup>4</sup>.

Die statistische Entropie ist ganz allgemein für beliebige normierte Wahrscheinlichkeiten  $P_k$  definiert durch

$$S_{Stat} := - \sum_k P_k \ln P_k$$

---

<sup>4</sup>für kleine Zahlen stimmt dies nicht!

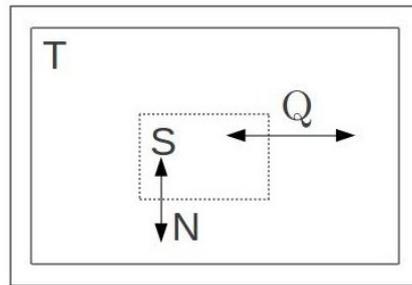


Abbildung 2.1

Im mikrokanonischen Ensemble erhält man somit die statistische Entropie aus der Zustandssumme<sup>5</sup>:

$$S_{Stat}(U, V, \bar{N}) = \ln Z^{Mik}(U, V, \bar{N}) \quad (2.3.1)$$

### 2.3.2 Großkanonische Verteilung

Nun wird ein großes, isoliertes System T mit Gesamtenergie  $U_0$ , Teilchenzahl  $N_0$  und Volumen  $V$  betrachtet, in dem sich ein kleineres System S mit offenen Wänden befindet (siehe Abb. 2.1). Es sei also ein Wärme- und Teilchenaustausch zwischen beiden Teilsystemen erlaubt. Die Teilsysteme werden dann durch die Zustandsvariablen Temperatur  $T_S, T_T$ , chemisches Potential  $\mu_S, \mu_T$  und Volumen  $V_T, V_S$  beschrieben und im Gleichgewicht der beiden Systeme gilt:

$$\begin{aligned} T_S &= T_T = T = const. \\ \mu_S &= \mu_T = \mu = const. \\ N_S + N_T &= N_0 = const. \end{aligned}$$

Die erste Näherung besteht nun in der Annahme einer schwachen Wechselwirkung der beiden Teilsysteme untereinander, sie sei aber dennoch so groß, dass der Gleichgewichtszustand nach einer endlichen Zeit erreicht wird. Für den Hamiltonoperator  $\hat{H}$  des Gesamtsystems kann man dann schreiben:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_T + \hat{H}_{WW(ST)} \approx \hat{H}_S + \hat{H}_T \quad (2.3.2)$$

Jetzt zerfällt der Zustand des Gesamtsystems in das Produkt der Teilsystemzustände:

$$|ijN_S N_T\rangle = |iN_S\rangle |jN_T\rangle \quad (2.3.3)$$

<sup>5</sup>in dieser Arbeit wird  $k_B = 1$  und  $\hbar = 1$  gesetzt

## 2 Theorie

Diese Zustände sind natürlich Elemente des oben eingeführten Fockraums, wobei der Satz an Quantenzahlen des Systems S bzw. T gegeben ist durch  $\{iN_S\}$  bzw.  $\{jN_T\}$ . Für das Energiespektrum des Gesamtsystems findet man:

$$\hat{H} |ijN_S N_T\rangle = (E_{iN_S}^S + E_{jN_T}^T) |ijN_S N_T\rangle = E_{ijN_S N_T}^{ST} |ijN_S N_T\rangle$$

und

$$E_{iN_S}^S + E_{jN_T}^T = E_{ijN_S N_T}^{ST} = U_0 = \text{const.}$$

Da das Gesamtsystem isoliert ist, kann man für dieses die mikrokanonische Verteilung ansetzen und erhält die Diagonalelemente der Dichtematrix in der Basis von (2.3.3)

$$\rho_{ijN_S N_T}^{ST} = \frac{1}{Z_{ST}^{Mik}(U_0, N_0)} \Delta[U_0 - E_{iN_S}^S - E_{jN_T}^T] \delta_{N_0, (N_S + N_T)}$$

Die Dichtematrix des Systems S wird durch Spurbildung über das System T abgeleitet:

$$\rho_{iN_S}^S = \sum_j \sum_{N_T} \frac{1}{Z_{ST}^{Mik}(U_0, N_0)} \Delta[U_0 - E_{iN_S}^S - E_{jN_T}^T] \delta_{N_0, (N_S + N_T)}$$

Dies wird mit der Zustandssumme des Systems T

$$Z_T^{Mik}(E, N) = \sum_j \sum_{N_T} \Delta[E - E_{jN_T}^T] \delta_{N, N_T}$$

und (2.3.1) zu

$$\rho_{iN_S}^S = \frac{Z_T^{Mik}(U_0 - E_{iN_S}^S, N_0 - N_S)}{Z_{ST}^{Mik}(U_0, N_0)} = \frac{e^{S_T(U_0 - E_{iN_S}^S, N_0 - N_S)}}{e^{S_{ST}(U_0, N_0)}} \quad (2.3.4)$$

Auf Grund der schwachen Wechselwirkung zwischen den beiden Teilsystemen darf man für die thermodynamischen Erwartungswerte und die Entropie die Additivität benutzen:

$$\begin{aligned} U_0 &= U_S + U_T \\ N_0 &= \bar{N}_S + \bar{N}_T \\ S_{ST}(U_0, N_0) &= S_S(U_S, \bar{N}_S) + S_T(U_T, \bar{N}_T) \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

Nun wird  $S_T(U_0 - E_{iN_S}^S, N_0 - N_S)$  um  $U_T$  und  $\bar{N}_T$  entwickelt, denn nach Voraussetzung ist  $|U_S - E_{iN_S}^S| \ll U_T$  und  $|\bar{N}_S - N_S| \ll \bar{N}_T$ :

$$\begin{aligned} S_T(U_T + U_S - E_{iN_S}^S, \bar{N}_T + \bar{N}_S - N_S) &\approx S_T(U_T, \bar{N}_T) \\ &+ \left. \frac{\partial S_T(U_T, \bar{N}_T)}{\partial U_T} \right|_{\bar{N}_T} (U_S - E_{iN_S}^S) \\ &+ \left. \frac{\partial S_T(U_T, \bar{N}_T)}{\partial \bar{N}_T} \right|_{U_T} (\bar{N}_S - N_S) + \mathcal{O}\left(\frac{N_S}{\bar{N}_T}\right) \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Die Ableitungen werden nun mit der Gibbsschen Fundamentalgleichung identifiziert:

$$\begin{aligned}
 dS_T &= \frac{1}{T_T} dU_T + \frac{P_T}{T_T} dV_T - \frac{\mu_T}{T_T} d\bar{N}_T \\
 \left. \frac{\partial S_T}{\partial U_T} \right|_{V_T, \bar{N}_T} &= \frac{1}{T} := \beta \\
 \left. \frac{\partial S_T}{\partial \bar{N}_T} \right|_{V_T, U_T} &= -\beta\mu
 \end{aligned} \tag{2.3.7}$$

Hiermit setzt man implizit statistische Entropie mit thermodynamischer Entropie gleich, was streng nur für makroskopische Systeme erfüllt ist.

Setzt man (2.3.6) und (2.3.7) in (2.3.4) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
 \rho_{iN_S}^S &= \frac{e^{S_T(U_T, \bar{N}_T)} e^{\beta(U_S - E_{iN_S}^S - \mu(\bar{N}_S - N_S))}}{e^{S_T(U_T, \bar{N}_T)} e^{S_S(U_S, \bar{N}_S)}} \\
 U_S &\rightarrow U, \quad N_S \rightarrow N, \quad S_S \rightarrow S \\
 \rho_{iN}^G &= e^{\beta\Omega} e^{-\beta(E_{iN} - \mu N)} \\
 \Omega &:= U - \mu\bar{N} - TS
 \end{aligned}$$

$\Omega$  wird als großkanonisches Potential bezeichnet.

Mit der Normierungsbedingung  $\sum_i \sum_N \rho_{iN}^G = 1$  wird die großkanonische Zustandssumme zu

$$\begin{aligned}
 Z^G(T, V, \mu) &:= e^{-\beta\Omega} = \sum_i \sum_N e^{-\beta(E_{iN} - \mu N)} \\
 \rho_{iN}^G(T, V, \mu) &= \frac{1}{Z^G} e^{-\beta(E_{iN} - \mu N)}
 \end{aligned} \tag{2.3.8}$$

Da die  $\rho_{iN}^G$  gerade die Diagonalelemente des Dichteoperators in der Basis der  $\{|iN\rangle\}$  sind, ist der großkanonische Dichteoperator gegeben durch

$$\hat{\rho}_G = \frac{1}{Z^G} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$$

In der Besetzungszahldarstellung sind  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}$  von der Form, wie sie in (2.1.8), (2.1.7) dargestellt ist.

Aus der Zustandssumme lassen sich nun alle thermodynamischen Erwartungswerte berechnen. So findet man für die Erwartungswerte der Energie und der Gesamtteilchenzahl:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle &= - \left. \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z^G \right|_{\beta, \mu, V} \\
 \langle \hat{N} \rangle &= \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z^G \right|_{\beta, V}
 \end{aligned} \tag{2.3.9}$$

## 2 Theorie

Für die Varianz dieser Größen ergibt sich:

$$\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle = \left. \frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial\beta} \right|_{\beta,\mu,V} = \left. \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} \ln Z^G \right|_{\beta,\mu,V} \quad (2.3.10)$$

$$\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle = \left. \frac{1}{\beta} \frac{\partial\langle\hat{N}\rangle}{\partial\mu} \right|_{\beta,V} = \left. \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial\mu^2} \ln Z^G \right|_{\beta,V} \quad (2.3.11)$$

Schließlich wird die Wärmekapazität wie folgt berechnet:

$$C_v := \left. \frac{\partial\langle\hat{H}\rangle}{\partial T} \right|_V \quad (2.3.12)$$

Hierbei wird nur das Volumen konstant gehalten, sodass nicht nur die Fluktuation der Energie, sondern auch die Fluktuation der Teilchenzahl zur Wärmekapazität beiträgt.

### 2.3.3 Gültigkeit der großkanonischen Beschreibung

In der Herleitung der großkanonischen Verteilung ist die wichtigste Annahme die schwache Wechselwirkung des kleineren Systems S mit dem größeren System T. Nur dann kann der Wechselwirkungsbeitrag zur Gesamtenergie, der in (2.3.2) gegeben ist durch  $\hat{H}_{WW(ST)}$ , vernachlässigt und die Additivität der Entropie sowie der Erwartungswerte in (2.3.5) benutzt werden. Geht man davon aus, dass die Wechselwirkung kurzreichweitig ist, so wird das Verhältnis der Wechselwirkungsenergie zwischen S und T zu der Wechselwirkungsenergie des Systems S näherungsweise zu dem Verhältnis der Oberfläche von S zum Volumen von S:

$$\left| \frac{E_{WW(ST)}}{E_{WW(S)}} \right| \approx \frac{A_S}{V_S} \propto \frac{N_S^{\frac{2}{3}}}{N_S} \xrightarrow{N_S \rightarrow \infty} 0$$

Dieser Beitrag verschwindet im thermodynamischen Limes.

In Fällen, in denen die hinreichende Bedingung  $|E_{WW(ST)}| \ll |E_{WW(S)}|$  nicht erfüllt ist, kann oft ein Großteil der Wechselwirkungsenergie eines Teilchens von S mit denen aus T dadurch beschrieben werden, dass das externe Fallenpotential  $U_F$  durch ein effektives Potential  $U_{eff}$  ersetzt wird. Vernachlässigt man z.B. Stöße zwischen den Teilchen aus S mit denen aus T, so bezeichnet man dieses Vorgehen als Mean-Field-Näherung. Der vernachlässigte Anteil der Wechselwirkungsenergie  $|E_{WW(ST)}|$  sollte dann so klein sein, dass sich eine großkanonische Beschreibung wieder rechtfertigen lässt.

Als Beispiel sei ein System S gegeben, welches nur aus einem Elektron besteht und mit anderen Elektronen aus T über die Coulombabstoßung wechselwirkt. In diesem Fall wird die Wechselwirkungsenergie zwischen S und T wegen der starken

Coulombwechselwirkung nicht vernachlässigbar sein und man muss versuchen ein effektives Potential am Ort des Elektrons aus S zu finden.

Ein weiteres Beispiel sind Festkörper, in denen die Atome auf Gitterplätzen angeordnet sind. Die Wechselwirkung eines Atoms mit den anderen kann dann für kleine Auslenkungen durch ein harmonisches Potential beschrieben werden.

Die Entwicklung der Entropie des Systems T in (2.3.6) und das Gleichsetzen von statistischer mit thermodynamischer Entropie in (2.3.7) werden durch die Annahmen, dass  $N_T \gg N_S$  und  $N_T$  sehr groß ist, begründet. Diese Annahmen sind in dieser Arbeit für das Modellsystem gut erfüllt, da in einer Simulation im großkanonischen Ensemble unendlich viele Teilchen zur Verfügung stehen, die dem System hinzugefügt werden können.

Die Übereinstimmung von Simulationen und experimentellen Ergebnissen stellt jedoch die größte Rechtfertigung für die großkanonische Beschreibung dar.

Um eine Aussage über die Vergleichbarkeit von Ergebnissen im Kanonischen und großkanonischen Ensemble zu treffen, muss man sich die relativen Schwankungen der Erwartungswerte ansehen. So findet man z.B. für die großkanonische, relative Schwankung der Energie mit (2.3.9) und (2.3.10) :

$$\frac{\langle \Delta H \rangle}{\langle H \rangle} \propto \frac{\sqrt{N}}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$$

Das Verschwinden der relativen Schwankung im thermodynamischen Limes gilt für alle Erwartungswerte sowohl im Kanonischen als auch im Großkanonischen Ensemble, denn dies ist eine direkte Folge aus dem *Gesetz der Großen Zahlen*. Aus diesem Grund lassen sich Ergebnisse, die mit verschiedenen Ensembles berechnet wurden, nur für sehr große Teilchenzahlen miteinander vergleichen. In dieser Arbeit ist die Zahl der simulierten Teilchen immer kleiner als 50, sodass die Ergebnisse nicht ohne weiteres vergleichbar sind. Eine Ausnahme stellt der Grundzustand dar, denn auch in diesem Fall verschwinden die relativen Schwankungen.

## 2.4 Ideales System

Ein ideales Vielteilchensystem von Fermionen im Großkanonischen Ensemble kann in Besetzungszahldarstellung vollkommen analytisch beschrieben werden, da sich die Zustandssumme konkret berechnen lässt.

Für das ideale System gelten alle in dem Abschnitt (2.1) eingeführten Zusammenhänge. Mit dem Vielteilchenzustand (2.1.6) des *Fockraums*, dem Hamilton- und Teilchenzahloperator (2.1.8), (2.1.7) wird die großkanonische Zustandssumme (2.3.8)

## 2 Theorie

zu:

$$\begin{aligned}
 Z^G(T, V, \mu) &= \text{Tr } \hat{\rho}_G \\
 &= \sum_{\{n\}} \langle \{n\} | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \{n\} \rangle \\
 &= \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum_{i=0}^{\infty} (\epsilon_i - \mu) n_i} \\
 &= \prod_{i=0}^{\infty} \sum_{n_i=0}^1 \sum_{n_{i+1}=0}^1 \dots e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i} \\
 &= \prod_{i=0}^{\infty} (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})
 \end{aligned}$$

Die Spur geht über alle Zustände des *Fockraums*, beinhaltet also Zustände jeglicher Teilchenzahlen.

Der Erwartungswert des Besetzungszahlenoperators lässt sich nun leicht berechnen:

$$\begin{aligned}
 n_i(\epsilon_i) := \langle \hat{n}_i \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} \ln Z^G \Big|_{\beta, \mu, V} \\
 &= \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}
 \end{aligned}$$

Dies ist gerade die Fermi-Verteilung, welche die mittlere Besetzungszahl des Einteilchenzustands mit der Energie  $\epsilon_i$  angibt. Wegen (2.1.8) und (2.1.7) erhält man damit auch die Erwartungswerte der Energie und der Teilchenzahl:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{N} \rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} n_i = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} \\
 \langle \hat{H} \rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon_i n_i = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\epsilon_i}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}
 \end{aligned}$$

Die Varianzen können mit (2.3.10) und (2.3.11) berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 \langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} (\Delta n_i)^2 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{(1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)})^2} \\
 \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon_i^2 \frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{(1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)})^2}
 \end{aligned}$$

Schließlich ergibt sich für die Wärmekapazität mit (2.3.12) zu

$$C_V = \beta^2 \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon_i (\epsilon_i - \mu) \frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{(1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)})^2}$$

Damit die Summen für ein konkretes System, dessen Einteilchenenergien  $\epsilon_i$  bekannt sind, mit einem Computer berechnet werden können, müssen diese abbrechen. Der Index  $i$ , bei dem man die Berechnung abbricht, wird dann Basisgröße genannt. Um sicher zu stellen, dass der dadurch entstehende Fehler sehr klein ist, bestimmt man die Basisgröße  $N_b$  am besten mit dem Kriterium  $n_{N_b}(\epsilon_i) \approx 0$ <sup>6</sup>.

## 2.5 System mit Wechselwirkung

Gegeben sei nun ein wechselwirkendes, fermionisches Vielteilchensystem. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{W} \\ \hat{H}_0 &= \sum_i \hat{h}_i \quad \text{und} \quad \hat{W} = \sum_{i < j} \hat{w}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\end{aligned}$$

$\hat{H}_0$  ist der Hamiltonoperator des idealen Systems und beinhaltet die kinetische Energie und die Energie eines externen Potentials. Die Problematik besteht nun darin, dass  $\hat{H}_0$  und  $\hat{W}$  im Allgemeinen nicht vertauschen, d.h.:

$$[\hat{H}_0, \hat{W}] \neq 0$$

Also ist  $\hat{W}$  in der Einteilchenbasis, welche  $\hat{H}_0$  diagonalisiert, nicht diagonal, was in der Besetzungszahldarstellung an den *Slater-Condon-Regeln* (2.1.9) zu sehen ist. Die Berechnung der Zustandssumme ist deshalb nicht trivial durchführbar wie im idealen Fall, denn dazu muss der Ausdruck

$$\begin{aligned}Z^G &= \text{Tr } \hat{\rho}_G \\ &= \sum_{\{n\}} \langle \{n\} | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \{n\} \rangle\end{aligned}$$

bestimmt werden. Ein Ausweg ist durch die Produkteigenschaft der Exponentialfunktion gegeben:

$$e^x = \left[ e^{\frac{x}{M}} \right]^M$$

Dann wird die Zustandssumme zu

$$\begin{aligned}Z^G &= \sum_{\{n\}} \langle \{n\} | \underbrace{e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})} e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})} \dots e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})}}_{\text{M-Faktoren}} | \{n\} \rangle \\ &= \sum_{\{n\}} \sum_{\{n^1\}} \dots \sum_{\{n^{M-1}\}} \langle \{n\} | e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \{n^1\} \rangle \\ &\quad \cdot \langle \{n^1\} | e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \{n^2\} \rangle \cdot \dots \cdot \langle \{n^{M-1}\} | e^{-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \{n\} \rangle\end{aligned} \tag{2.5.1}$$

<sup>6</sup>in konkreter Anwendung wird hier ' $\approx$ ' durch '=' ersetzt

Im letzten Schritt wurden  $M - 1$  Identitäten des Fockraums der Form

$\hat{1} = \sum_{\{n\}} |\{n\}\rangle \langle\{n\}|$  eingefügt. Damit hat man die ursprüngliche Dichtematrix durch ein Produkt von Dichtematrizen einer  $M$ -fach höheren Temperatur ersetzt. Für diese Hochtemperaturdichtematrizen kann man verschiedene Näherungen ansetzen, wobei der Fehler dabei für steigende Temperaturen und größere  $M$  immer kleiner, aber die Anzahl der Summationen immer größer wird. Mit Monte-Carlo-Methoden ist es möglich, diese großen Summationen zu bewältigen.

Ein neuer Ansatz, um (2.5.1) zu berechnen, ist durch die *Kink-basierte Formulierung* (siehe [4]) gegeben. In dieser wird zwar zunächst auch eine Näherung für die Hochtemperaturdichtematrizen gefunden, allerdings wird anschließend der Übergang  $M \rightarrow \infty$  durchgeführt, sodass der begangene Fehler verschwindet und die Methode exakt ist.

### 2.5.1 Diagonalnäherung

In der Diagonalnäherung berücksichtigt man nur den diagonalen Anteil des Wechselwirkungsoperators. Dann vereinfacht sich der Ausdruck für die Matrixelemente des Wechselwirkungsoperator in der Basis der Vielteilchenzustände  $|\{n\}\rangle$  (siehe Glg. 2.1.9) zu

$$\langle\{n\}|\hat{W}|\{\bar{n}\}\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=i+1}^{\infty} w_{ij}^- n_i n_j \delta_{\{n\}\{\bar{n}\}}$$

und der Kommutator zwischen  $\hat{H}_0$  und  $\hat{W}$  verschwindet:

$$[\hat{H}_0, \hat{W}] = 0$$

Deshalb kann man für den großkanonischen Dichteoperator nun schreiben:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_G &= \frac{1}{Z_G} e^{-\beta(\hat{H}_0 + \hat{W} - \mu\hat{N})} \\ &= \frac{1}{Z_G} e^{-\beta\hat{H}_0} e^{-\beta\hat{W}} e^{\beta\mu\hat{N}} \end{aligned}$$

Hierbei wurde verwendet, dass der Teilchenzahloperator sowohl mit dem idealen Hamiltonoperator als auch dem Wechselwirkungsoperator vertauscht. Dies ist klar, da die Fockzustände  $|\{n\}\rangle$  auch Eigenfunktionen des Teilchenzahloperators sind (siehe 2.1.7).

Man erhält somit für die Zustandssumme:

$$\begin{aligned}
 Z^G &= \sum_{\{n\}} \langle \{n\} | e^{-\beta \hat{H}_0} e^{-\beta \hat{W}} e^{\beta \mu \hat{N}} | \{n\} \rangle \\
 &= \sum_{\{n\}} e^{-\beta E_{\{n\}}^0} e^{-\beta W_{\{n\}}} e^{\beta \mu N_{\{n\}}} \\
 &= \sum_{\{n\}} e^{-\beta (E_{\{n\}}^0 + W_{\{n\}} - \mu N_{\{n\}})}
 \end{aligned}$$

Hierin ist  $E_{\{n\}}^0$  die gesamte Idealenergie,  $W_{\{n\}}$  die gesamte Wechselwirkungsenergie und  $N_{\{n\}}$  die Teilchenzahl des Zustands  $|\{n\}\rangle$  und es gilt

$$\begin{aligned}
 N_{\{n\}} &= \sum_{i=0}^{\infty} n_i \\
 E_{\{n\}}^0 &= \sum_{i=0}^{\infty} n_i \epsilon_i \\
 W_{\{n\}} &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=i+1}^{\infty} w_{ij}^- n_i n_j
 \end{aligned}$$

Die Summen gehen also über alle Besetzungszahlen des Zustands  $|\{n\}\rangle$ . Um den Ausdruck noch etwas zu vereinfachen, kann man zusätzlich eine effektive Energie definieren:

$$\begin{aligned}
 E_{\{n\}}^{eff} &:= E_{\{n\}}^0 + W_{\{n\}} \\
 Z^G &= \sum_{\{n\}} e^{-\beta (E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}
 \end{aligned}$$

Man sieht, dass die Idealenergien in der Diagonalnäherung um einen vom Zustand  $|\{n\}\rangle$  abhängigen Term  $\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=i+1}^{\infty} w_{ij}^- n_i n_j$  verschoben sind. Man könnte deshalb das externe Potential durch ein effektives Einteilchenpotential ersetzen, welches die Wechselwirkung beinhaltet. Bei der Diagonalnäherung handelt es sich somit um eine Art Mean-Field-Näherung.

Die thermodynamischen Erwartungswerte lassen sich leicht mit (2.3.9)-(2.3.12) berechnen. Für die mittlere Gesamtenergie und Teilchenzahl ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} E_{\{n\}}^{eff} e^{-\beta (E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} \\
 \langle \hat{N} \rangle &= \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} N_{\{n\}} e^{-\beta (E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}
 \end{aligned}$$

## 2 Theorie

Die mittlere Besetzungszahl des Einteilchenzustands mit der Energie  $\epsilon_i$  wird zu:

$$\langle \hat{n}_i \rangle = \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} n_{\{n\}}^i e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$$

Für die Varianzen der Gesamtenergie und der Teilchenzahl erhält man:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle &= \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 \\ &= \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} (E_{\{n\}}^{eff})^2 e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} - \left[ \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} E_{\{n\}}^{eff} e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} \right]^2 \\ \langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle &= \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 \\ &= \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} (N_{\{n\}})^2 e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} - \left[ \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} N_{\{n\}} e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} \right]^2 \end{aligned}$$

Schließlich findet man für die Wärmekapazität:

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{1}{T^2} \left[ \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle + \mu \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{N} \rangle - \mu \langle \hat{H} \hat{N} \rangle \right] \\ &= \frac{1}{T^2} \left[ \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle + \mu \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{N} \rangle - \frac{1}{Z^G} \sum_{\{n\}} E_{\{n\}}^{eff} N_{\{n\}} e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})} \right] \end{aligned}$$

## 3 Monte-Carlo

In diesem Kapitel soll der Metropolis-Algorithmus erläutert werden. Dieser Algorithmus ist von enormer Bedeutung für die Berechnung von Erwartungswerten im kanonischen und großkanonischen Ensemble mit Monte-Carlo-Methoden, denn er ermöglicht das Generieren von Zufallszahlen mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung, deren Normierung nicht bekannt ist. Zu den Monte-Carlo-Methoden gehören grundsätzlich alle Algorithmen, die auf Zufallszahlen basieren.

### 3.1 Metropolisalgorithmus

Thermodynamische Erwartungswerte eines Systems im Gleichgewicht sind im Allgemeinen von der Form:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int A(x)p(x)dx \quad (3.1.1)$$
$$x = (x_1, x_2, \dots, x_{3N})$$

Die Integrationsvariable  $x$  umfasst dabei alle Ortskoordinaten der  $N$  Teilchen und gegebenenfalls noch andere, den Systemzustand definierende Größen, wie beispielsweise den Spin. Im quantenmechanischen Fall werden die Integrale zu Summen über alle diskreten Systemzustände  $i$ :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i A_i p_i$$

In (3.1.1) ist  $p(x)$  meistens durch einen Boltzmannfaktor der Form  $\frac{1}{Z}e^{-\beta E(x)}$  gegeben. Wenn gilt

$$p(x) \geq 0 \quad f.a. \quad x$$
$$\int p(x)dx = 1$$

so kann  $p(x)$  als Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Systemzustände bzw. Konfigurationen interpretiert werden. Wenn man nun  $M$  Konfigurationen  $x_i$  generiert, die entsprechend der Wahrscheinlichkeit  $p(x)$  verteilt sind, so ist ein guter Schätzwert des Integrals gegeben durch den Wert der Observablen in der Konfiguration  $i$  gemittelt über alle  $M$  Konfigurationen:

$$\langle \hat{A} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i)$$

### 3 Monte-Carlo

Diese Methode wird *Importance Sampling* genannt. Das Problem besteht nun darin, dass die Normierung der Verteilung, also die Zustandssumme, nicht bekannt ist und die Konfigurationen somit nicht direkt mit der gewünschten Verteilung erzeugt werden können. Würde man die Normierung kennen, so wäre eine Simulation nicht nötig, denn die Erwartungswerte könnten aus dieser direkt berechnet werden.

Eine sehr raffinierte Lösung stellt der Metropolis-Algorithmus dar. In diesem definiert man eine Übergangswahrscheinlichkeit  $v(x_i \rightarrow x_{i+1})$  vom Zustand  $x_i$  zum Zustand  $x_{i+1}$ , mit der, ausgehend von einer Startkonfiguration  $x_0$ , alle weiteren Zustände zufällig erzeugt werden. Die Menge aller mit  $v(x_i \rightarrow x_{i+1})$  generierten Zustände wird als Markov-Kette und der Übergang von einer Konfiguration zur nächsten, wobei diese auch unverändert bleiben kann, als Monte-Carlo-Schritt bezeichnet. Damit die Zustände der Markov-Kette gemäß  $p(x_i)$  verteilt sind, muss die Übergangswahrscheinlichkeit die sogenannte *Detailed Balance* erfüllen,

$$p(x_i)v(x_i \rightarrow x_{i+1}) = p(x_{i+1})v(x_{i+1} \rightarrow x_i)$$

wobei eine mögliche Lösung der *Detailed Balance* gegeben ist durch

$$v(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \min \left[ 1, \frac{p(x_{i+1})}{p(x_i)} \right] \quad (3.1.2)$$

Es existieren auch weniger strenge Bedingungen für die Übergangswahrscheinlichkeit, jedoch sind diese meist schwerer zu gewährleisten. Eine weitere wichtige Forderung ist die Ergodizität. Dies bedeutet, dass jede Konfiguration in einer endlichen Anzahl an Schritten und mit einer nicht verschwindenden Übergangswahrscheinlichkeit erreicht werden kann. So darf der Konfigurationsraum nicht in separierte Teile zerfallen.

Sind diese Bedingungen erfüllt, dann sind die Konfigurationen der Markov-Kette ab einer endlichen Anzahl von Schritten, die man als Equibrilationszeit bezeichnet, mit der Wahrscheinlichkeit  $p(x_i)$  verteilt. Der Vorteil des Metropolis-Algorithmus besteht nun darin, dass in (3.1.2) nur das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten  $p(x_i)$  und  $p(x_{i+1})$  benötigt wird und die Normierung eliminiert wird.

In vielen Fällen ist es effizienter nicht alle Schritte mit der gleichen Wahrscheinlichkeit auszuwählen. Dann kann man die Übergangswahrscheinlichkeit  $v$  in eine Auswahlwahrscheinlichkeit  $T(x_i \rightarrow x_{i+1})$  und eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $A(x_i \rightarrow x_{i+1})$  aufteilen (siehe [3]):

$$v(x_i \rightarrow x_{i+1}) = T(x_i \rightarrow x_{i+1})A(x_i \rightarrow x_{i+1})$$

Die Lösung der *Detailed Balance* ist dann gegeben durch

$$A(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \min \left[ 1, \frac{T(x_{i+1} \rightarrow x_i)p(x_{i+1})}{T(x_i \rightarrow x_{i+1})p(x_i)} \right]$$

Der Algorithmus funktioniert nun so, dass mit der Wahrscheinlichkeit  $T(x_i \rightarrow x_{i+1})$  ein Schritt vorgeschlagen wird, der das System von der Konfiguration  $x_i$  in

die Konfiguration  $x_{i+1}$  bringt. Anschließend wird die Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $A(x_i \rightarrow x_{i+1})$  berechnet und eine Zufallszahl aus  $[0, 1)$  erzeugt. Nur wenn diese kleiner ist als  $A(x_i \rightarrow x_{i+1})$ , wird das System in den Zustand  $x_{i+1}$  überführt.

Der Algorithmus ist am effizientesten, wenn die Akzeptanzwahrscheinlichkeit etwa 50% beträgt. Eine geschickte Wahl von  $T(x_{i+1} \rightarrow x_i)$  kann dabei entscheidend dafür sein dieses Ziel zu erreichen.

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass  $p(x)$  i.a. nicht positiv ist. Gerade für fermionische Systeme ist dies auf Grund der Antisymmetrie der Fall. Ein Ausweg besteht darin, nur den Betrag von  $p(x)$  als Wahrscheinlichkeit zu interpretieren und das Vorzeichen der Observable zuzuordnen. Dieses Verfahren führt jedoch zu einem mit der Systemgröße exponentiell wachsenden Rechenaufwand für eine vorgegebene Genauigkeit. Dies wird als *fermionisches Vorzeichenproblem* bezeichnet.

In dieser Arbeit tritt dieses Problem auf Grund des diagonalen Hamilton- bzw. Wechselwirkungsoperators nicht auf.

## 3.2 Testsystem

Als zweidimensionales Testsystem werden Fermionen, die der Coulombwechselwirkung unterliegen, in einer zweidimensionalen, harmonischen Falle verwendet. Die Fermionen sind spinpolarisiert, was bedeutet, dass alle Teilchen die gleiche Spinprojektion besitzen und diese nicht geändert werden kann. Dies entspricht einem starken, äußeren Magnetfeld. Dieses System ist ausreichend allgemein, um Aussagen über das Verhalten der Methode zu treffen.

In natürlichen Einheiten lautet der Hamiltonoperator des N-Teilchen Systems:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_o + \hat{W} \\ &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r_i^2}{2} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}\end{aligned}$$

Hierin ist  $m$  die Masse der Teilchen. Der Hamiltonoperator kann in dimensionslosen Einheiten wie folgt geschrieben werden:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (\hat{p}_i^2 + r_i^2) + \sum_{i<j}^N \frac{\lambda}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Hierin wurde der Kopplungsparameter  $\lambda = \frac{E_C}{\omega}$  eingeführt. Er ist ein Maß für das Verhältnis der Coulombenergie  $E_C = \frac{e^2}{r_0}$  mit  $r_0 = \frac{1}{\sqrt{m\omega}}$  und der Fallenenergie. In diesen Einheiten ist die Energie durch  $E' = \frac{E}{\omega}$ , die Temperatur durch  $T' = \frac{T}{\omega}$  und das chemische Potential durch  $\mu' = \frac{\mu}{\omega}$  gegeben. Als Einteilchenbasis werden die bekannten Eigenfunktion des zweidimensionalen, harmonischen Oszillators verwendet. Die Einteilchenenergien sind also gegeben durch  $\epsilon_i = (n_{ix} + n_{iy}) + 1$ , wobei  $n_{ix}, n_{iy} \in$

$N_o$  die Quantenzahl in X- bzw. Y-Richtung darstellen. Der Einteilchenzustand mit der Energie  $\epsilon_i = \bar{n}$  ist somit  $\bar{n}$ -fach entartet.

Die Zweiteilchenintegrale  $\omega_{ijkl}$  (siehe 2.1.10) wurden im Voraus mit hoher Genauigkeit für alle obigen Einteilcheneigenfunktionen, deren Energie  $\epsilon_i$  kleiner oder gleich 12 ist, berechnet<sup>1</sup>.

### 3.3 Metropolis-Algorithmus für das Testsystem

In der Simulation des oben eingeführten Testsystems im großkanonischen Ensemble wird nur der Diagonalanteil der Wechselwirkung berücksichtigt, sodass alle in (2.5.1) eingeführten Zusammenhänge gelten. Ein Systemzustand bzw. eine Konfiguration im Metropolis-Algorithmus besteht also aus einem einzigen Fockzustand  $|\{n\}\rangle = |n_0 n_1 \dots\rangle$ . Im Programm wird dieser durch die Besetzungszahlen  $n_0, n_1, \dots, n_{N_B}$  des  $i$ -ten Einteilchenzustandes realisiert, wobei die Einteilchenzustände nach deren Energie in aufsteigender Reihenfolge geordnet sind, d.h. es ist  $\epsilon_i \leq \epsilon_{i+1}$ . Die Basisgröße  $N_B$  ist in dieser Arbeit effektiv auf 77 beschränkt, da die Zweiteilchenintegrale nur bis zur Einteilchenenergie  $\epsilon_i = 12$  zur Verfügung stehen, was mit der Entartung gerade dieser Basisgröße entspricht. Bei der Berechnung von aussagekräftigen Ergebnissen ist darauf zu achten, dass die Einteilchenenergien mit der höchsten Energie kaum noch besetzt sind.

Die Erwartungswerte in (2.5.1) sind alle von der Form:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_G} \sum_{\{n\}} A_{\{n\}} e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$$

Hierin kann nun  $\frac{1}{Z_G} e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$  als Wahrscheinlichkeit des Zustands  $|\{n\}\rangle$  interpretiert werden. Für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit eines Monte-Carlo-Schritts ist die Normierung  $\frac{1}{Z_G}$  nicht von Bedeutung, weshalb man das Gewicht einer Konfiguration zur Zustandssumme  $W(\{n\}) := e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$  definiert. In einer Simulation mit der Basisgröße  $N_B$  wird dies ausgeschrieben zu

$$W(\{n\}) = e^{-\beta\left(\sum_{i=0}^{N_B} (\epsilon_i n_i + \sum_{j=i+1}^{N_B} \omega_{ijij}^- n_i n_j - \mu n_i)\right)} \quad (3.3.1)$$

#### 3.3.1 Monte-Carlo-Schritte

Im Folgenden sollen die verwendeten Monte-Carlo-Schritte, die eine Konfiguration  $|\{n\}\rangle$  in eine andere Konfiguration  $|\{n'\}\rangle$  überführen, vorgestellt und deren Akzep-

<sup>1</sup>Die Berechnung der verwendeten Zweiteilchenintegrale wurde von K. Balzer mit Mathematica durchgeführt

### 3.3 Metropolis-Algorithmus für das Testsystem

tanzwahrscheinlichkeit bestimmt werden. Es sind insgesamt 5 Schritte, die jeweils mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{5}$  ausgewählt werden.

Der erste Schritt besteht darin, die Besetzung eines zufällig ausgewählten Einteilchenzustandes  $p$ , dessen Besetzungszahl  $n_p$  sei, zu ändern, d.h. ein Teilchen hinzuzufügen oder zu entfernen. Ist  $n_p = 0$  so wird  $n'_p = 1$  gesetzt und umgekehrt. Da alle  $N_B$  Einteilchenzustände gleichwahrscheinlich ausgewählt werden, lautet die *Detailed Balance*

$$\frac{1}{5} \frac{1}{N_B} A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) W(\{n\}) = \frac{1}{5} \frac{1}{N_B} A(\{n'\} \rightarrow \{n\}) W(\{n'\})$$

Damit ergibt sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit zu

$$\begin{aligned} A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) &= \min \left[ 1, \frac{W(\dots n'_i \dots)}{W(\dots n_i \dots)} \right] \\ &= \min \left[ 1, \exp \left\{ -\beta(\epsilon_p + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^{N_B} \omega_{ipip}^- n_i - \mu)(n'_p - n_p) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Um die letzte Gleichung zu erhalten, muss man den Exponenten des Gewichts in (3.3.1) etwas umschreiben, indem man den Beitrag des  $p$ -ten Einteilchenniveaus zur Wechselwirkungsenergie abspaltet:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=0}^{N_B} \sum_{j=i+1}^{N_B} \omega_{ijij}^- n_i n_j \\ &= \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^{N_B} \sum_{\substack{j=i+1 \\ j \neq p}}^{N_B} \omega_{ijij}^- n_i n_j + \sum_{i=0}^{p-1} \omega_{ipip}^- n_p n_i + \sum_{j=p+1}^{N_B} \omega_{pjpj}^- n_j n_p \\ &= \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^{N_B} \sum_{\substack{j=i+1 \\ j \neq p}}^{N_B} \omega_{ijij}^- n_i n_j + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^{N_B} \omega_{ipip}^- n_i n_p \end{aligned}$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass  $\omega_{ipip}^- = \omega_{pjpj}^-$  ist, wie man durch Betrachtung von (2.1.10) sieht. Wenn man nun das Verhältnis der beiden Gewichte der Konfigurationen berechnet, so fallen alle Terme weg, in denen  $i, j \neq p$  ist und man erhält (3.3.2). Es empfiehlt sich immer die Ausdrücke zur Berechnung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit so weit wie möglich zu vereinfachen, da die Laufzeit des Programms hauptsächlich durch diese bestimmt wird.

Im eindimensionalen System ist nur dieser eine Schritt notwendig um die Ergodizität zu gewährleisten. Der Versuch, nur diesen Schritt in zwei Dimensionen zu verwenden, scheiterte jedoch, da dieser Schritt allein, wie sich im nächsten Kapitel zeigen wird, auf Grund der Entartung der Einteilchenenergieniveaus nicht mehr ergodisch ist.

### 3 Monte-Carlo

Der zweite Schritt verschiebt ein Teilchen von einem besetzten Einteilchenzustand zu einem unbesetzten, was man als Einteilchenanregung bezeichnen kann. Es werden dazu folgende Schritte ausgeführt:

1. Wähle gleichverteilt einen der  $N$  besetzten Einteilchenzustände, dieser sei  $p$
2. Wähle gleichverteilt einen der  $N_B - N$  unbesetzten Einteilchenzustände, dieser sei  $k$
3. Ändere die Besetzung dieser beiden Einteilchenzustände

Der anschließende Rückschritt von der Konfiguration  $|\{n'\}\rangle$  in die Konfiguration  $|\{n\}\rangle$  besteht darin, genau die beiden Zustände  $p$  und  $k$  wieder auszuwählen und deren Besetzung zu ändern. Damit erhält man für die *Detailed Balance*:

$$\frac{1}{5} \frac{1}{N} \frac{1}{N_B - N} A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) W(\{n\}) = \frac{1}{5} \frac{1}{N'} \frac{1}{N_B - N'} A(\{n'\} \rightarrow \{n\}) W(\{n'\})$$

und da  $N = N'$  ist, wird die Akzeptanzwahrscheinlichkeit zu

$$\begin{aligned} A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) &= \min \left[ 1, \frac{W(\{n'\})}{W(\{n\})} \right] \\ &= \min \left[ 1, \exp \left\{ -\beta \left( \epsilon_k n'_k - \epsilon_p n_p + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p, k}}^{N_B} \omega_{ik}^- n'_i n'_k - \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq p, k}}^{N_B} \omega_{ip}^- n_i n_p \right) \right\} \right] \end{aligned}$$

Im dritten Monte-Carlo-Schritt wird vorgeschlagen zwei Teilchen hinzuzufügen, die nicht weiter voneinander entfernt sind als die Entartung eines der beiden Teilchen. Diese Wahl hat sich als die effizienteste herausgestellt. Die Erklärung dafür wird im nächsten Kapitel gegeben. Der Ablauf des Schritts ist:

1. Wähle gleichverteilt einen der  $N_B - N$  freien Zustände aus, dieser sei  $p$
2. Wähle gleichverteilt einen der  $\bar{N}_{free}(p)$  freien Zustände aus, dieser sei  $k$ . Mit der Entartung  $p_E$  des Zustands  $p$  gilt dabei f.a. Zustände  $i \in \bar{N}_{free}(p) : |i - p| \leq p_E$  und  $i \neq p$
3. Ändere die Besetzung von  $p$  und  $k$

Der vierte Schritt stellt das Gegenteil vom dritten dar. Der Ablauf ist also

1. Wähle gleichverteilt einen der  $N$  besetzten Zustände aus, dieser sei  $p$
2. Wähle gleichverteilt einen der  $\bar{N}_{occ}(p)$  besetzten Zustände aus, dieser sei  $k$ . Mit der Entartung  $p_E$  des Zustands  $p$  gilt dabei f.a. Zustände  $i \in \bar{N}_{occ}(P) : |i - p| \leq p_E$  und  $i \neq p$

3. Ändere die Besetzung von p und k

Wenn man drei als Hinschritt und vier als Rückschritt verwendet, erhält man aus der *Detailed Balance* die Akzeptanzwahrscheinlichkeit von Schritt drei:

$$\frac{1}{5} \frac{1}{N_B - N} \frac{1}{\bar{N}_{free}(p)} A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) W(\{n\}) = \frac{1}{5} \frac{1}{N'} \frac{1}{\bar{N}'_{occ}(p)} A(\{n'\} \rightarrow \{n\}) W(\{n'\})$$

und damit

$$A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) = \min \left[ 1, \frac{(N_B - N) \bar{N}_{free}(p)}{N' \bar{N}'_{occ}(p)} \frac{W(\{n'\})}{W(\{n\})} \right]$$

Analog ergibt sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit von Schritt vier zu:

$$A(\{n\} \rightarrow \{n'\}) = \min \left[ 1, \frac{N \bar{N}_{occ}(p)}{(N_B - N') \bar{N}'_{free}(p)} \frac{W(\{n'\})}{W(\{n\})} \right]$$

Der fünfte und damit letzte Schritt besteht darin, die Quantenzahlen  $n_{ix}$  und  $n_{iy}$  aller besetzten Einteilchenzustände  $i$  zu vertauschen, es ist also  $n'_{ix} = n_{iy}$  und  $n'_{iy} = n_{ix}$ . Dieser Schritt ist kein richtiger Monte-Carlo-Schritt, da er auf Grund der Invarianz des Gewichts unter Vertauschung der Quantenzahlen eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit von eins hat und somit immer angenommen wird. Eine Begründung für den Schritt wird im nächsten Kapitel gegeben.

Es soll zunächst noch gezeigt werden, dass sich das Gewicht einer Konfiguration unter Vertauschung der Quantenzahlen der besetzten Zustände nicht ändert. Das Gewicht der Konfiguration  $|\{n\}\rangle$  war gegeben durch

$$W(\{n\}) = e^{-\beta \left( \sum_{i=0}^{N_B} (\epsilon_i n_i + \sum_{j=i+1}^{N_B} \omega_{ijij}^- n_i n_j - \mu n_i) \right)}$$

Da die Teilchenzahl gleich bleibt und die Einteilchenenergien  $\epsilon_i = n_{ix} + n_{iy} + 1$  offenbar invariant unter Vertauschung der Quantenzahlen sind, bleibt nur zu zeigen, dass der Wechselwirkungsbeitrag dies auch ist. Dazu betrachte man  $\omega_{ijij}$ , denn es ist  $\omega_{ijij}^- := \omega_{ijij} - \omega_{ijji}$ :

$$\omega_{ijij} = \int d^3 r \int d^3 r' \Phi_i(\vec{r})^* \Phi_j(\vec{r}')^* w(|\vec{r} - \vec{r}'|) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}')$$

Nun ist  $i, j$  ein Multiindex  $i = \{n_{ix}, n_{iy}\}$ , wobei im folgenden zur Vereinfachung  $i = \{i_x, i_y\}$  und  $j = \{j_x, j_y\}$  geschrieben wird. Es ist also zu zeigen, dass  $\omega_{ijij} = \omega_{i'j'i'j'}$  gilt, wobei  $i' = \{i_y, i_x\}$  und  $j' = \{j_y, j_x\}$  ist. Mit den als Produkt geschriebenen

### 3 Monte-Carlo

zweidimensionalen Oszillatoreigenfunktionen  $\Phi_i(x, y) = \phi_{i_x}(x)\phi_{i_y}(y)$  wird obiger Ausdruck zu:

$$\begin{aligned}\omega_{ijij} &= \int dx \int dy \int dx' \int dy' \phi_{i_x}^*(x) \phi_{i_y}^*(y) \phi_{j_x}^*(x') \phi_{j_y}^*(y') \\ &\quad \cdot w(|(x, y) - (x', y')|) \phi_{i_x}(x) \phi_{i_y}(y) \phi_{j_x}(x') \phi_{j_y}(y') \\ &= \int dx \int dy \int dx' \int dy' \phi_{i_y}^*(y) \phi_{i_x}^*(x) \phi_{j_y}^*(y') \phi_{j_x}^*(x') \\ &\quad \cdot w(|(x, y) - (x', y')|) \phi_{i_y}(y) \phi_{i_x}(x) \phi_{j_y}(y') \phi_{j_x}(x')\end{aligned}$$

und mit der Umbenennung der Integrationsvariablen  $x \leftrightarrow y, x' \leftrightarrow y'$

$$\begin{aligned}\omega_{ijij} &= \int dx \int dy \int dx' \int dy' \phi_{i_y}^*(x) \phi_{i_x}^*(y) \phi_{j_y}^*(x') \phi_{j_x}^*(y') \\ &\quad \cdot w(|(y, x) - (y', x')|) \phi_{i_y}(x) \phi_{i_x}(y) \phi_{j_y}(x') \phi_{j_x}(y') \\ &= \int d^2r \int d^2r' \Phi_{i'}^*(x, y) \Phi_{j'}^*(x', y') w(|(x, y) - (x', y')|) \Phi_{i'}(x, y) \Phi_{j'}(x', y') \\ &= \omega_{i'j'i'j'}\end{aligned}$$

Analog zeigt man, dass  $\omega_{ijji} = \omega_{i'j'j'i'}$  ist. Damit ist die Invarianz der Gewichte der Konfigurationen unter Vertauschung der Quantenzahlen der Einteilchenzustände gezeigt. Bei einer korrekten Simulation muss daher auch die mittlere Besetzung der Einteilchenniveaus diese Symmetrie aufweisen.

## 4 Ergebnisse

Ein Großteil des Arbeitsaufwands für diese Arbeit bestand darin, eine minimale Anzahl an nötigen Schritten zu finden, die die Bedingung der Ergodizität erfüllen. Die dabei entstandenen Ergebnisse werden im ersten Teil des Kapitels gezeigt.

Im zweiten Teil wird der Aufbau der Grundzustände aufgezeigt und erläutert. Im dritten Teil werden die Simulationsergebnisse für den idealen Fall mit den theoretisch berechneten verglichen, um die Korrektheit der Simulation zu überprüfen.

Die Ergebnisse für das Testsystem mit Wechselwirkung werden im letzten Teil angegeben und diskutiert.

### 4.1 Begründung der Monte-Carlo-Schritte

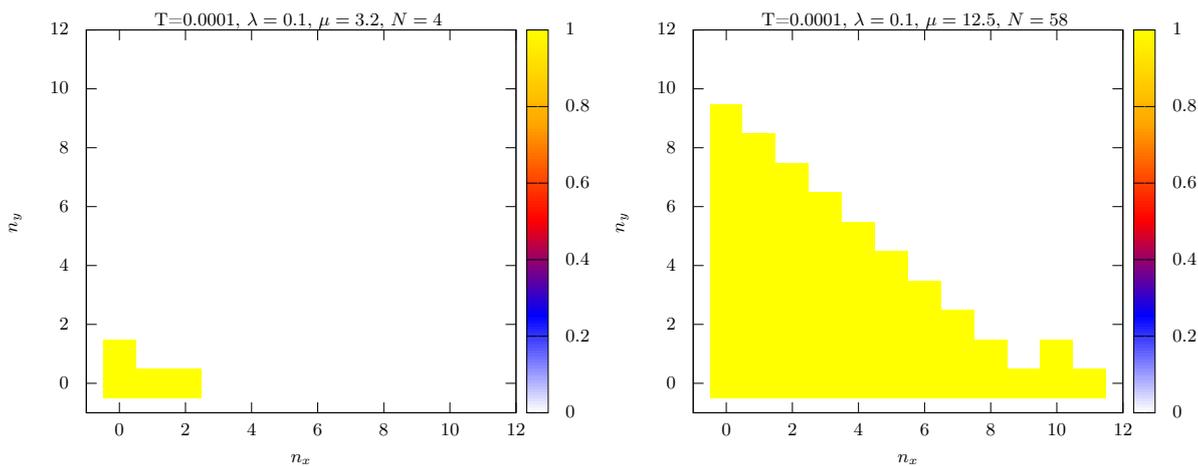


Abbildung 4.1: 1-T-Schritt: Mittlere Besetzung der Einteilchenzustände für eine Temperatur  $T = 0,0001$ , Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und chemischem Potential  $\mu = 3,2$  (links),  $\mu = 12,5$  (rechts). Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_0$  definieren einen Einteilchenzustand, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

Die Arbeit von T. Schoof (siehe [4]) hat gezeigt, dass für die Diagonalnäherung in einer Dimension für das gleiche Testsystem der einzig notwendige Schritt dadurch gegeben ist, nur ein Teilchen hinzuzufügen oder zu entfernen. Dies ist gerade Schritt

## 4 Ergebnisse

eins aus Abschnitt (3.3.1) und soll hier als 1-T-Schritt bezeichnet werden. Es liegt also nahe in zwei Dimensionen ebenfalls nur diesen Schritt zu verwenden. Die mittleren Besetzungszahlen der Einteilchenzustände im Grundzustand für eine Kopplungsstärke von  $\lambda = 0, 1$  sowie chemischen Potentialen  $\mu = 3, 2$  und  $\mu = 12, 5$ , die nur mit diesem Schritt berechnet wurden, sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die verwendete Basisgröße nur bis  $n_x + n_y = 11$  reicht, d.h. dass alle Quadrate in Abbildung 4.1 mit  $n_x + n_y > 11$  nur Null gesetzt wurden, aber nicht berechnet wurden. Für die Berechnung von Grundzuständen sind i.a. nur wenige Monte-Carlo-Schritte notwendig, da alle Schritte abgelehnt werden, sobald sich das System in dem durch die Parameter bestimmten Grundzustand oder einem metastabilen Zustand befindet. Dies erkennt man, wenn man das Verhältnis der Gewichte (siehe 3.3.1) zweier Konfigurationen für kleine Temperaturen betrachtet.

Man sieht sofort, dass die Grundzustände in Abbildung 4.1 nicht symmetrisch bezüglich der Vertauschung der Quantenzahlen  $n_x$  und  $n_y$  sind. Am Ende des letzten Kapitels wurde jedoch gezeigt, dass diese Symmetrie in allen korrekten Berechnungen vorhanden sein muss. Die mit dem 1-T-Schritt erzielten Ergebnisse sind also sicher falsch.

Auf Grund der Symmetrie der verwendeten Basis erschien es mir sinnvoll einen neuen Schritt zu verwenden, in dem die Besetzung von ein bis sechs, zufällig ausgewählten Einteilchenzuständen geändert wird. Dieser Schritt beinhaltet also das hinzufügen und entfernen von bis zu sechs Teilchen sowie die Anregung von bis zu drei Teilchen und wird im Folgenden als 6-T-Schritt bezeichnet. Die damit berechneten Grundzustände für die gleichen Parameter sind in Abbildung 4.2 zu sehen. Diese Grundzustände weisen nun die verlangte Symmetrie auf. Um herauszufinden, ob die mit dem 6-T-Schritt berechneten Grundzustände tatsächlich die richtigen sind<sup>1</sup>, muss man die Grundzustände, die mit dem 1-T- bzw. 6-T-Schritt berechnet wurden, für gleiche Kopplungsstärken und chemisches Potential miteinander vergleichen. Anhand der Gewichte der Konfigurationen für diese Parameter kann man dann sehen, welche Schritte tatsächlich nötig sind, um die 6-T-Ergebnisse zu erhalten und ob es sich um den Grundzustand handelt. Die Gewichte der Konfigurationen lassen sich direkt mit dem Programm berechnen.

In Abbildung 4.3 sind die Grundzustände für ein chemisches Potential von  $\mu = 12, 2$  gezeigt. Der Grundzustand für den 1-T-Schritt besitzt 55 Teilchen. Das Ergebnis für den 6-T-Schritt ergibt jedoch 61 Teilchen im Grundzustand. In der Tabelle von Abbildung 4.4 sind die Exponenten der Gewichte der Konfigurationen, die nötig sind um von dem 1-T-Ergebnis (Konfiguration 1) zum 6-T-Ergebnis (Konfiguration 8) zu kommen. Der Grundzustand ist derjenige, der das größte Gewicht  $W(\{n\}) = e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$  für  $T \rightarrow 0$  besitzt und damit mit dem kleinsten Wert von  $E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}}$ . Alle in der Tabelle nicht aufgeführten Zustände haben ein deutlich kleineres Gewicht. Damit ist ersichtlich, dass der 1-T-Schritt nicht ausreicht um den richtigen

---

<sup>1</sup>natürlich nur innerhalb des hier verwendeten Formalismus der Diagonalnäherung

#### 4.1 Begründung der Monte-Carlo-Schritte

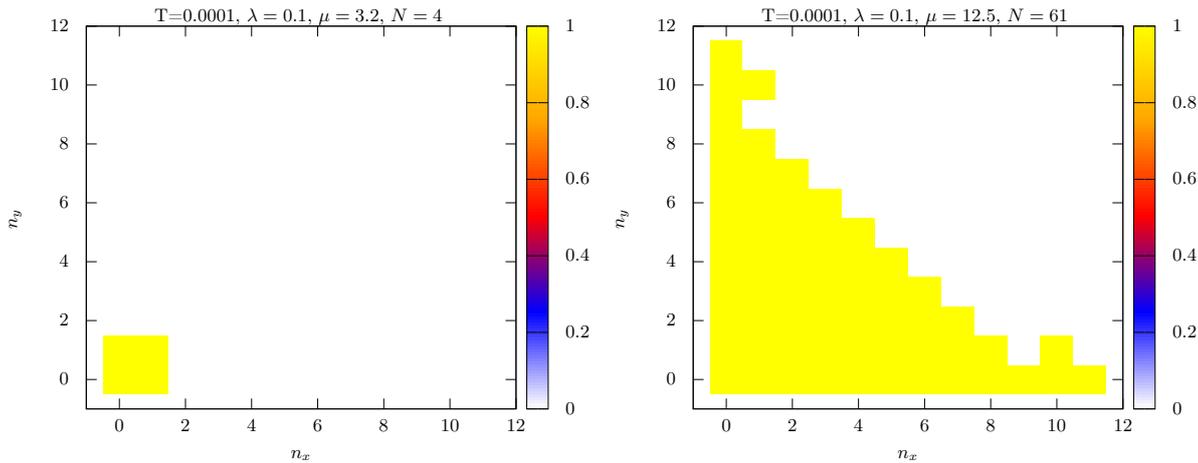


Abbildung 4.2: Berechnung mit 6-T-Schritt: Mittlere Besetzung der Einteilchenzustände für eine Temperatur  $T = 0,0001$ , Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und chemischem Potential  $\mu = 3,2$  (links),  $\mu = 12,5$  (rechts). Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren einen Einteilchenzustand, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

Grundzustand zu erhalten. Alle mit dem 1-T-Schritt erreichbaren Zustände haben ein kleineres Gewicht. Erst das Hinzufügen von zwei Teilchen ist wieder möglich. Danach genügt es ein oder zwei Teilchen hinzuzufügen, um den richtigen Grundzustand zu erreichen. Die Tabelle begründet somit die in Abschnitt (3.3.1) eingeführten Schritte 3 und 4 sowie das Auswählen von zwei Teilchen, die nicht weiter voneinander entfernt sind als die Entartung eines der beiden, denn solche zwei Einteilchenzustände, die von einer zur nächsten Konfiguration in der Tabelle führen, erfüllen gerade dieses Kriterium.

Die Notwendigkeit von Schritt 5 in Abschnitt (3.3.1), in dem die Quantenzahlen der Einteilchenzustände vertauscht werden, wird mit einem weiteren Beispiel zu verstehen sein. Dazu werden wieder die Grundzustände für den 1-T- und 6-T-Schritt betrachtet, allerdings diesmal für ein chemisches Potential  $\mu = 10,8$ . Die beiden Grundzustände sind in Abbildung 4.5 dargestellt. Sie unterscheiden sich nur um 2 Teilchen, aber das 6-T Ergebnis ist nicht ganz symmetrisch bezüglich der Vertauschung der Quantenzahlen, da die Niveaus  $0/10$  und  $10/0$  sowie  $11/0$  und  $0/11$  nicht gleich besetzt sind. In Tabelle 4.6 sind wieder alle Zustände eingetragen, die das 1-T-Ergebnis in das 6-T-Ergebnis überführen. Man gelangt von Konfiguration 1 nur zu 4, wenn man zwei Teilchen hinzufügt. Die durch Hinzufügen nur eines Teilchens erreichbaren Zustände haben alle ein kleineres Gewicht, als die Konfiguration, in der nur alle Einteilchenzustände bis einschließlich der 8. Schale besetzt sind. Mit der „k-ten Schale“ sind alle Zustände gemeint, für die  $n_x + n_y = k$  gilt. In diesem Beispiel ist es also ebenfalls ausreichend bis zu zwei Teilchen hinzuzufügen. Die

## 4 Ergebnisse

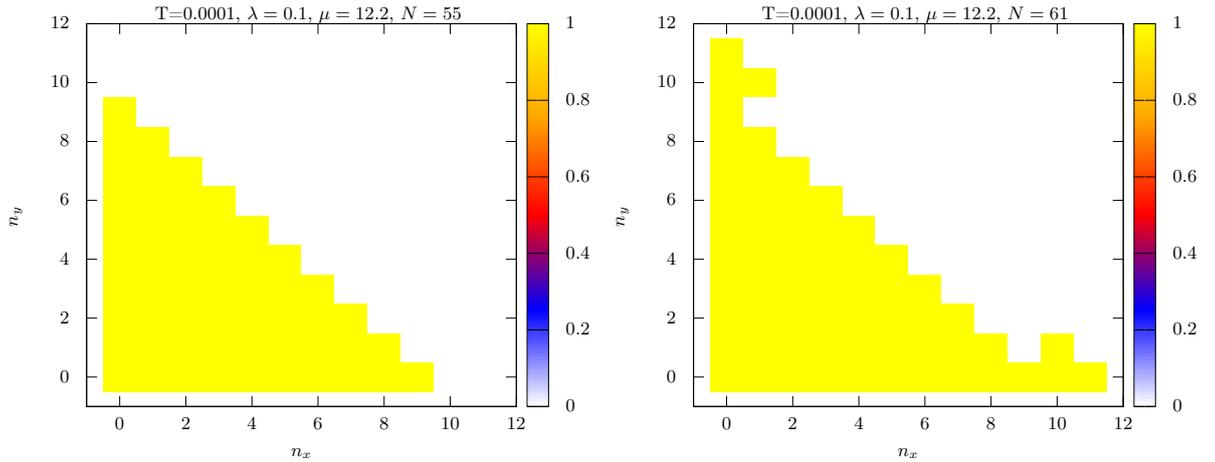


Abbildung 4.3: Berechnung mit 1-T-Schritt (links) und 6-T-Schritt (rechts): Mittlere Besetzung der Einteilchenzustände für eine Temperatur  $T = 0,0001$ , Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und chemischem Potential  $\mu = 12,2$ . Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren einen Einteilchenzustand, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

Nr.	9. Schale voll (N=55) plus	$E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}}$	+T
1	nichts	-226.315	0
2	0/10 [10/0]	-225.776	1
3	0/11 [11/0]	-224.921	1
4	1/10 [10/1]	-224.719	1
5	0/10 [10/0] 0/11 [11/0]	-228.902	2
6	0/10 [10/0] 0/11 [11/0] 1/10 [10/1]	-229.521	1
7	0/10 10/0 0/11 11/0 1/10 [10/1]	-231.947	2
8	0/10 10/0 0/11 11/0 1/10 10/1	-232.486	1

Abbildung 4.4: Exponenten des Gewichts der einzelnen Konfigurationen bei einem chemischen Potenzial  $\mu = 12,2$  und einer Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$ : In der ersten Spalte steht die Nummer des Zustands und in der zweiten die besetzten Niveaus, die zur 9. Schale hinzukommen. Die 9. Schale bezeichnet dabei alle Einteilchenzustände mit  $n_x + n_y = 9$ . Mit 0/10 wird der Zustand mit  $n_x = 0$  und  $n_y = 10$  definiert. Die eckigen Klammern bedeuten, dass der Zustand 0/10 oder 10/0 besetzt ist. In der dritten Spalte stehen die Exponenten der Gewichte und in der vierten die Anzahl der Teilchen, die hinzugefügt werden müssen, um von der vorherigen zu der jeweiligen Konfiguration zu gelangen. Die Übergänge von der ersten zu einer Zeile mit rot markierten Exponenten sind für den Grundzustand verboten.

#### 4.1 Begründung der Monte-Carlo-Schritte

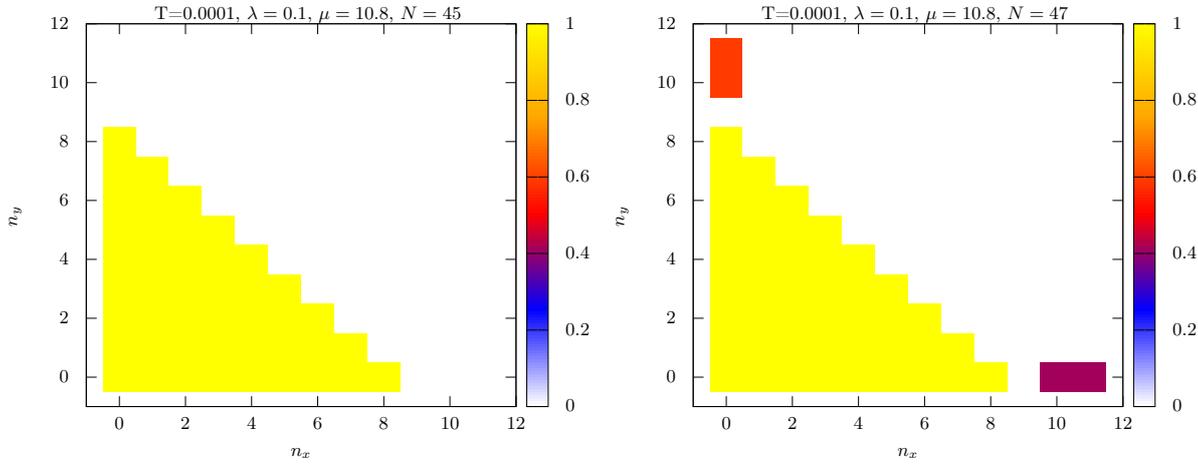


Abbildung 4.5: Berechnung mit 1-T-Schritt (links) und 6-T-Schritt (rechts): Mittlere Besetzung der Einteilchenzustände für eine Temperatur  $T = 0,0001$ , Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und chemischem Potential  $\mu = 10,8$ . Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren einen Einteilchenzustand, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

Nr.	8. Schale voll (N=45) plus	$E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}}$	+T
1	nichts	-159.577	0
2	0/10 [10/0]	-157.912	1
3	0/11 [11/0]	-156.957	1
4	0/10 [10/0] 0/11 [11/0]	-159.611	2

Abbildung 4.6: Exponenten des Gewichts der einzelnen Konfigurationen bei einem chemischen Potenzial  $\mu = 10,8$  und einer Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$ : In der ersten Spalte steht die Nummer des Zustands und in der zweiten die besetzten Niveaus, die zur 8. Schale hinzukommen. Die 8. Schale bezeichnet dabei alle Einteilchenzustände mit  $n_x + n_y = 8$ . Mit 0/10 wird der Zustand mit  $n_x = 0$  und  $n_y = 10$  definiert. Die eckigen Klammern bedeuten, dass der Zustand 0/10 oder 10/0 besetzt ist. In der dritten Spalte stehen die Exponenten der Gewichte und in der vierten die Anzahl der Teilchen, die hinzugefügt werden müssen, um von der vorherigen zu der jeweiligen Konfiguration zu gelangen. Die Übergänge von der ersten zu einer Zeile mit rot markierten Exponenten sind für den Grundzustand verboten.

#### 4 Ergebnisse

Zeile 4 in Tabelle 4.6 hat sowohl für 0/10 und 0/11 besetzt sowie für 10/0 und 11/0 besetzt das gleiche Gewicht, was auf Grund der verlangten Symmetrie so sein muss. Es müssten also alle diese Einteilchenzustände im Grundzustand genau mit 0.5 besetzt sein. Eine einfache Erklärung für die Abweichung des mit dem 6-T-Schritt berechneten Grundzustands besteht darin, dass die Wahrscheinlichkeit bei diesem Schritt vier bestimmte Einteilchenzustände auszuwählen und diese entsprechend zu verändern etwa 1 : 50Mio. beträgt. Selbst die Wahrscheinlichkeit mit einem Schritt, der genau zwei Teilchen verschiebt, vier bestimmte Orbitale auszuwählen ist für diesen Fall etwa 1 : 1Mio., was für einen Monte-Carlo-Schritt viel zu klein ist. Für sehr kleine Temperaturen sind diese eigentlich symmetrischen Zustände metastabil. Eine Möglichkeit das Problem zu lösen besteht darin bei der Simulation die Messung für einen kleinen Zeitraum auszusetzen und dabei die Temperatur zu erhöhen. Dadurch werden die Wahrscheinlichkeiten für Übergänge in andere Konfigurationen wieder endlich. Anschließend setzt man die Temperatur wieder runter und lässt das System equilibrieren, bevor man mit der Messung fortsetzt. Das System wird beim Equilibrieren in einen anderen metastabilen Zustand gelangen. Um eine gute Statistik zu bekommen muss dieser Vorgang jedoch sehr oft wiederholt werden und ist deshalb für diese Methode wegen der Equibrilationszeit nicht effektiv genug.

Speziell für diesen Fall sollte es auch möglich sein erst am Ende der Simulation die Besetzung der Einteilchenzustände zu symmetrisieren. Ich habe mich dazu entschieden dieses Problem mit Schritt 5 aus dem Abschnitt (3.3.1) zu lösen, in dem ich einfach die Quantenzahlen vertausche. Dies entspricht einem Wechsel von einem Teil des Konfigurationsraums in einen anderen von diesem separierten. Zudem benötigt der Schritt kaum Rechenaufwand.

Bei dem zweiten Schritt, der Einteilchenanregung, in Abschnitt (3.3.1) kann ich nicht genau sagen, ob er notwendig ist, um einen möglichst einfachen Satz an ergodischen Schritten zu haben. Allerdings ist auch dieser Schritt nicht rechenaufwändig und besitzt zudem eine verhältnismäßig hohe Annahmewahrscheinlichkeit, weshalb ich diesen einfach benutzt habe.

## 4.2 Schalenaufbau

In diesem Abschnitt soll der Schalenaufbau für das Testsystem mit Wechselwirkung erläutert werden, d.h. die Besetzungsreihenfolge der Orbitale im Grundzustand mit steigender Teilchenzahl. Im idealen System sind die Orbitale der einzelnen Schalen alle energetisch entartet. Für ein bestimmtes chemisches Potential ist eine Schale im Grundzustand daher ganz oder gar nicht besetzt. In einem System mit Wechselwirkung ist die Entartung der Schalen bis auf die Symmetrie bezüglich der Vertauschung der Quantenzahlen aufgehoben und der Schalenaufbau wird daher anders verlaufen. In Abbildung 4.7 (Seite 34) ist der Aufbau der 5. Schale dargestellt, wobei das chemische Potential immer um 0,1 erhöht wird. Es werden zuerst die Orbitale besetzt, bei denen der Unterschied zwischen den Quantenzahlen möglichst klein ist, also von „innen nach außen“. Dieses Aufbauprinzip gilt für alle Schalen bis einschließlich der achten. Für die unteren Schalen sind somit gerade die Einteilchenzustände günstig bezüglich der Wechselwirkung, deren Quantenzahlen gleich groß sind.

Abbildung 4.8 (Seite 35) zeigt die Besetzung der Orbitale mit steigendem chemischen Potential nach der achten Schale. Ab einem chemischen Potential von  $\mu = 10,7$  ändert sich das Aufbauprinzip grundlegend. Bei  $\mu = 10,8$  wird die 9. Schale gar nicht, aber dafür die beiden äußersten Orbitale der 10. und 11. Schale halb und bei  $\mu = 10,9$  ganz besetzt. Erst bei einem chemischen Potential von  $\mu = 11,5$  kommen weitere drei Teilchen hinzu, wobei die 11. Schale von außen mit den Orbitalen (1/10) und (10/1) ganz und die äußersten Zustände der 9. Schale halb besetzt werden. In Abbildung 4.9 (Seite 36) kann man dann sehen, dass, nachdem die äußersten Orbitale der 9. Schale ganz besetzt sind, zwei Teilchen auf die Zustände (9/0) und (0/9) gesetzt werden. Hiernach ändert sich der Aufbau wieder und es kommen auf einmal bei  $\mu = 12,1$  vier Teilchen in den innersten Orbitalen der 9. Schale hinzu. Anschließend wird die 9. Schale ganz und danach die 10. Schale weiter aufgefüllt. Für die höheren Schalen sind somit, im Gegensatz zu den unteren, gerade die Zustände günstig, die ganz außen liegen, bzw. deren Quantenzahlen einen möglichst großen Unterschied aufweisen.

Die Grundzustände der untersten Schale sind nur richtig innerhalb des Formalismus einer Diagonalnäherung sind. Würde der Einfluss der außerdiagonalen Beiträge in der Berechnung mit berücksichtigt werden, so wäre der Aufbau möglicherweise ein ganz anderer. Da die Wechselwirkung mit einer Kopplungsstärke von  $\lambda = 0,1$  sehr schwach ist und die außerdiagonalen Beiträge dann vernachlässigbar klein sind, ist anzunehmen, dass der Aufbau sich von einer exakten Rechnung nicht zu stark unterscheidet. Natürlich würde auch die Wahl einer anderen Kopplungsstärke die Reihenfolge der Besetzung verändern, aber das grundlegende Prinzip in den höheren und unteren Schalen bleibt erhalten. Bei einer stärkeren Wechselwirkung würden beispielsweise die äußeren Orbitale der höheren Schalen auf Grund der größeren Abstoßung früher besetzt werden. Die Grundzustände, bei denen die höheren Schalen zum Teil besetzt sind, würden bei Verwendung einer größeren Basis auch anders aussehen, wenn es in höheren Schalen noch günstigere Zustände gibt.

## 4 Ergebnisse

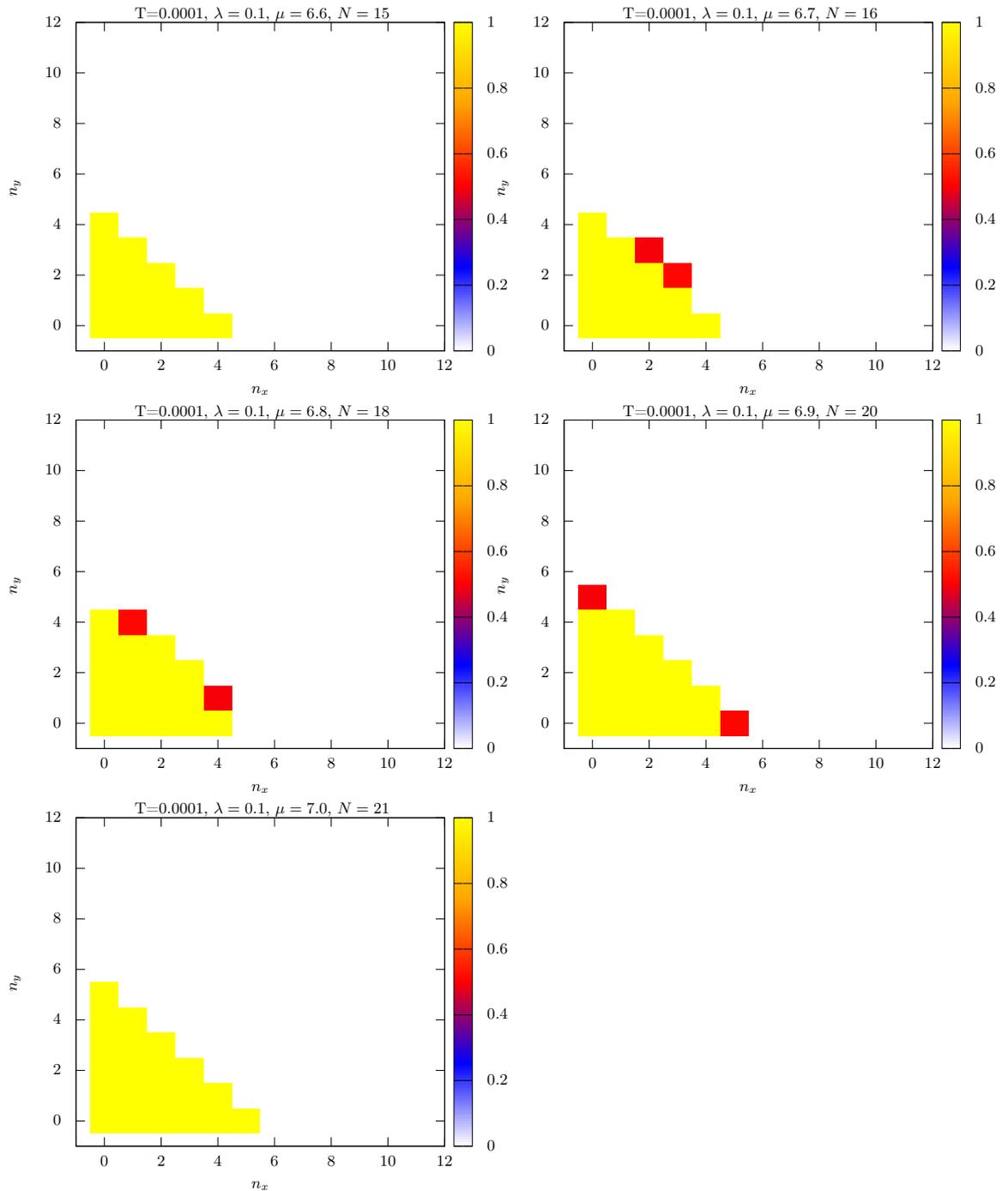


Abbildung 4.7: Aufbau der 5. Schale: Besetzung der Einteilchenorbitale im Grundzustand ( $T=0.0001$ ) für eine Kopplungskonstante  $\lambda = 0,1$  für verschiedene chemische Potentiale  $\mu$ . Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren ein Einteilchenorbital, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

## 4.2 Schalenaufbau

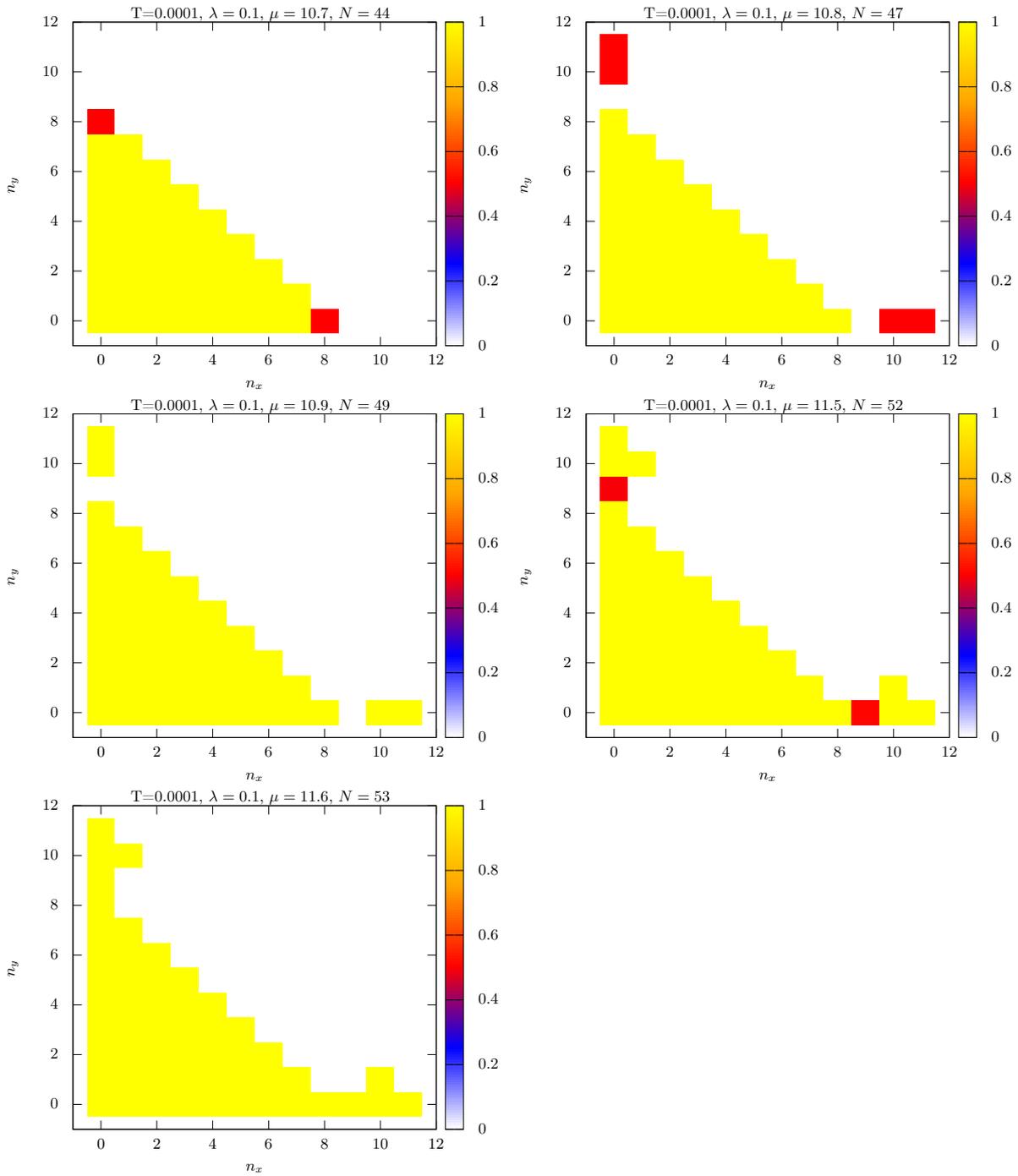


Abbildung 4.8: Aufbau nach der 8. Schale ( $\mu = 10,7$  bis  $\mu = 11,6$ ): Besetzung der Einteilchenorbitale im Grundzustand ( $T=0.0001$ ) für eine Kopplungskonstante  $\lambda = 0,1$  für verschiedene chemische Potentiale  $\mu$ . Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren ein Einteilchenorbital, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

## 4 Ergebnisse

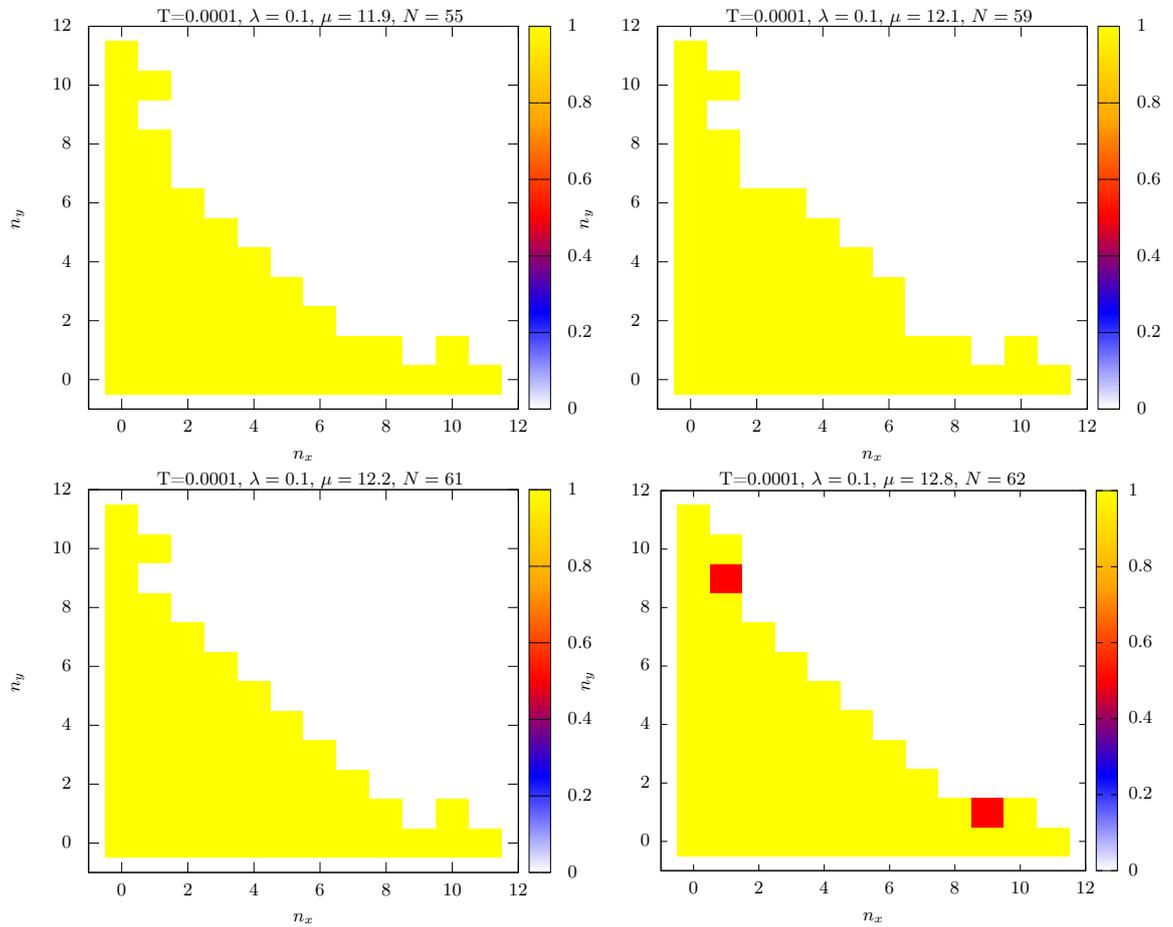


Abbildung 4.9: Aufbau nach der 8. Schale ( $\mu = 11,9$  bis  $\mu = 12,8$ ): Besetzung der Einteilchenorbitale im Grundzustand ( $T=0.0001$ ) für eine Kopplungskonstante  $\lambda = 0,1$  für verschiedene chemische Potentiale  $\mu$ . Je ein Paar von Quantenzahlen  $n_x, n_y \in \mathbb{N}_o$  definieren ein Einteilchenorbital, d.h. ein Quadrat. Die Farbe des Quadrats gibt entsprechend der Skala die Besetzung des Zustands an.

### 4.3 Ergebnisse für das ideale System

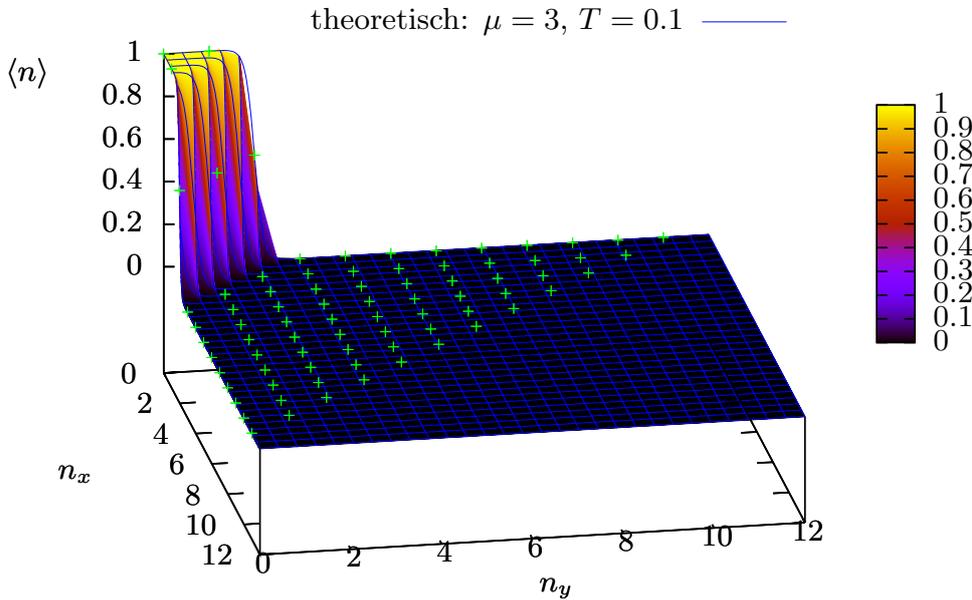


Abbildung 4.10: zweidimensionale Fermiverteilung: mittlere Besetzungszahlen  $\langle n \rangle$  der Einteilchenzustände, die durch je einen Punkt  $(n_x, n_y)$  gegeben sind, bei einer Temperatur  $T = 0,1$  und einem chemischen Potential  $\mu = 3$ , was gerade eine Teilchenzahl von  $N = 4,5$  ergibt. Der Konturplot wurde theoretisch berechnet. Die grünen Punkte sind die Simulationsergebnisse.

Als zusätzlicher Test des Programms wurden Erwartungswerte für das ideale Testsystem berechnet und diese mit den theoretischen Erwartungswerten verglichen. Die Berechnung der theoretischen Erwartungswerte wurde mit den Zusammenhängen aus Abschnitt 2.4 durchgeführt, wobei entsprechend für die Einteilchenenergien  $\epsilon_i = n_x + n_y + 1$  eingesetzt wurde und die Summen bis zu einer Basisgröße  $N_B = 400$  ausgeführt wurden, um ein exaktes Ergebnis zu erhalten.

Die folgenden Simulationsergebnisse wurden mit  $2 \cdot 10^7$  Monte-Carlo-Schritten pro Datenpunkt berechnet. Dabei wurde nur alle 100 Schritte ein Wert für die Mittelwertbildung verwendet. Dies gewährleistet eine hinreichend kurze Autokorrelationszeit zwischen den verwendeten Werten.

Der theoretisch berechnete Konturplot der mittleren Besetzungszahlen der Orbitale für eine Temperatur  $T = 0,1$  und ein chemisches Potential  $\mu = 3,0$ , was gerade 4,5 Teilchen ergibt, ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Die Graphik zeigt nichts anderes als eine zweidimensionale Fermiverteilung mit einer der Temperatur entsprechend harten

#### 4 Ergebnisse

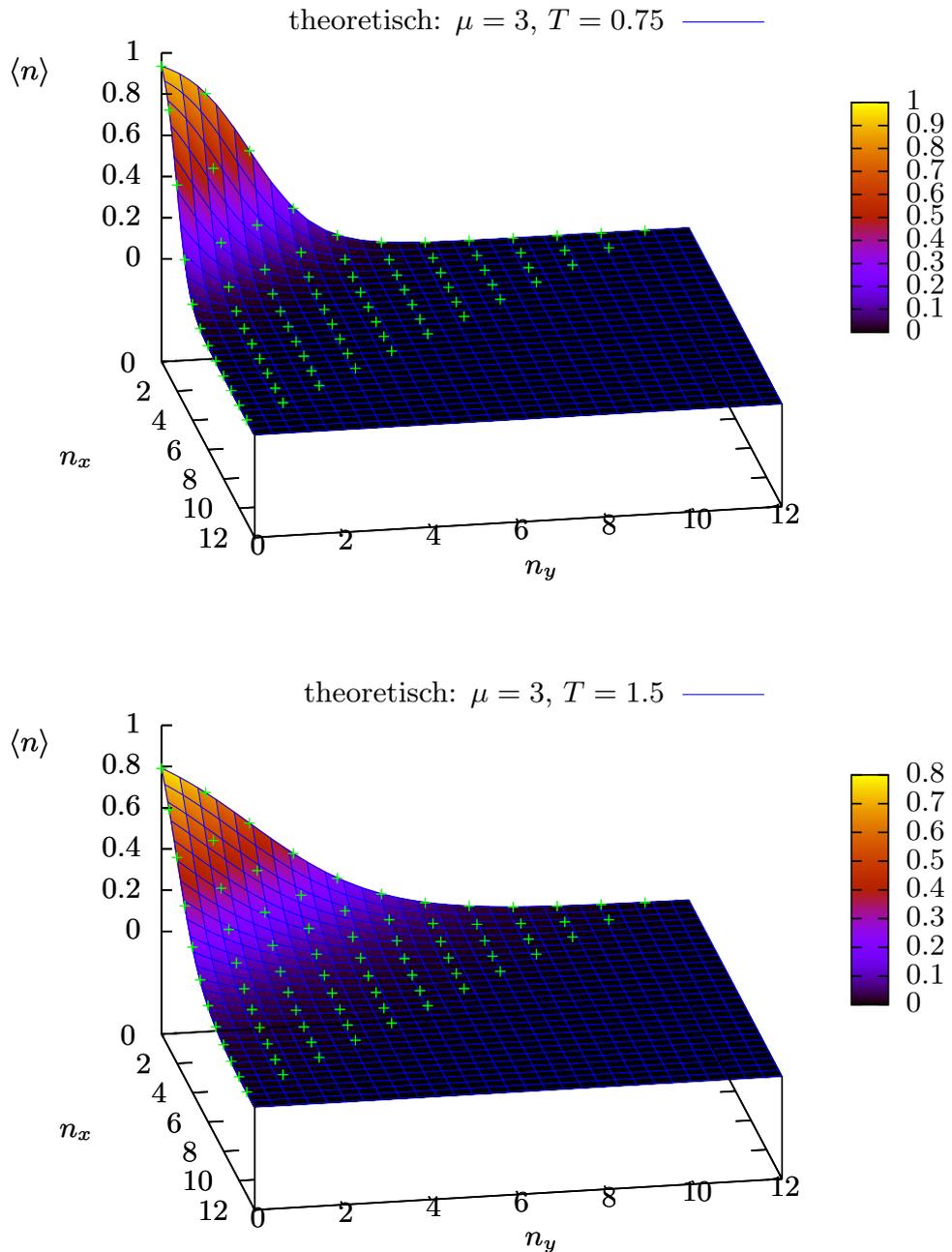


Abbildung 4.11: zweidimensionale Fermiverteilung: mittlere Besetzungszahlen  $\langle n \rangle$  der Einteilchenzustände, die durch je einen Punkt  $(n_x, n_y)$  gegeben sind, für die Temperaturen  $T = 0,75$  (oben),  $T = 1,5$  (unten) für ein chemisches Potential  $\mu = 3,0$ , was gerade eine Teilchenzahl von  $N \approx 5,3$  (oben) und  $N \approx 7,8$  (unten) ergibt. Der Konturplot wurde theoretisch berechnet. Die grünen Punkte sind die Simulationsergebnisse.

### 4.3 Ergebnisse für das ideale System

Fermikante. Die grünen Punkte stellen die mit dem Programm berechneten Werte dar und man sieht, dass diese exakt auf dem theoretisch berechneten Konturplot liegen. Man hätte intuitiv erwarten können, dass die Fermikante radialsymmetrisch zum Ursprung ist. Da die Orbitale mit gleicher Energie jedoch nicht im Abstand  $\sqrt{(n_x)^2 + (n_y)^2}$  zum Ursprung liegen, sondern auf Linien mit  $n_x + n_y = \text{const.}$ , ist auch die Fermikante auf so einer Linie.

Eine Erhöhung der Temperatur führt wie erwartet zum aufweichen der Fermikante, also zu einer Entvölkerung der untersten und Bevölkerung der höheren Orbitale. Die Fermiverteilungen für die Temperaturen  $T = 0.75$  und  $T = 1.5$  für das gleiche chemische Potential sind in Abbildung 4.11 zu sehen. Auch hier stimmen Berechnung und Theorie gut überein.

Abbildung 4.12 zeigt die Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Temperatur ebenfalls für ein chemisches Potential von  $\mu = 3,0$ . Die blaue Linie wurde theoretisch berechnet und die roten Punkte sind das Ergebnis der Simulation. Es ist zu sehen, dass die Simulation nur bis etwa einer Temperatur von  $T = 1,2$  mit der Theorie innerhalb des Fehlers übereinstimmt. Die Abweichung bis  $T = 1,6$  ist jedoch gering. Betrachtet man dagegen die darunter abgebildete Wärmekapazität pro Teilchen, so fällt auf, dass die berechneten Werte ab einer Temperatur  $T = 1,4$  deutlich stärker von der Theorie abweichen als die Energie pro Teilchen. Die Wärmekapazität ist proportional zum 2. Moment der Energie und somit eine deutlich empfindlichere Größe als die Energie selbst. Wenn man noch einmal die Fermiverteilung in Abbildung 4.11 für das gleiche chemische Potential bei einer Temperatur von  $T = 1,5$  betrachtet, so würde man davon ausgehen, dass die Basis hinreichend groß ist, um richtige Ergebnisse zu liefern. Es ist zwar in dem Konturplot nicht zu sehen, aber schon die 8. Schale ist mit weniger als 0,05 Teilchen besetzt und die Besetzung nimmt exponentiell ab. Bei der Wärmekapazität führt allerdings schon diese kleine Näherung zu deutlichen Abweichungen von der Theorie.

Wie Abbildung 4.13 andeutet, divergiert der Fehler für die Wärmekapazität für sehr kleine Temperaturen. Da die Werte dennoch exakt auf der theoretischen Kurve liegen, muss es sich um einen numerischen Fehler handeln, der im Programm durch die kleinen Zahlen entsteht. Ich habe es bis jetzt noch nicht geschafft diesen Fehler zu beheben.

Als letztes ist in Abbildung 4.14 der Verlauf der Idealenergie sowie der Teilchenzahl in Abhängigkeit von dem chemischen Potential für die Temperaturen  $T = 0,1$  und  $T = 1,0$  gezeigt. Der synchrone, stufenartige Verlauf der Idealenergie und der Teilchenzahl für  $T = 0.1$  ist dadurch zu erklären, dass bei tiefen Temperaturen, genau wie in der Fermiverteilung (Abb.4.10) zu sehen ist, die Orbitale genau bis zur Fermikante aufgefüllt werden. Erst wenn das chemische Potential die Energie der nächsten Schale erreicht, wird diese ganz gefüllt. Die Zunahme der Teilchen und somit auch der Energie wird mit jeder „Stufe“ entsprechend der zunehmenden Entartung der höheren Energieniveaus immer größer. Bei einer höheren Temperatur

#### *4 Ergebnisse*

werden die Stufen durch die thermische Anregung ge­lättet.

### 4.3 Ergebnisse für das ideale System

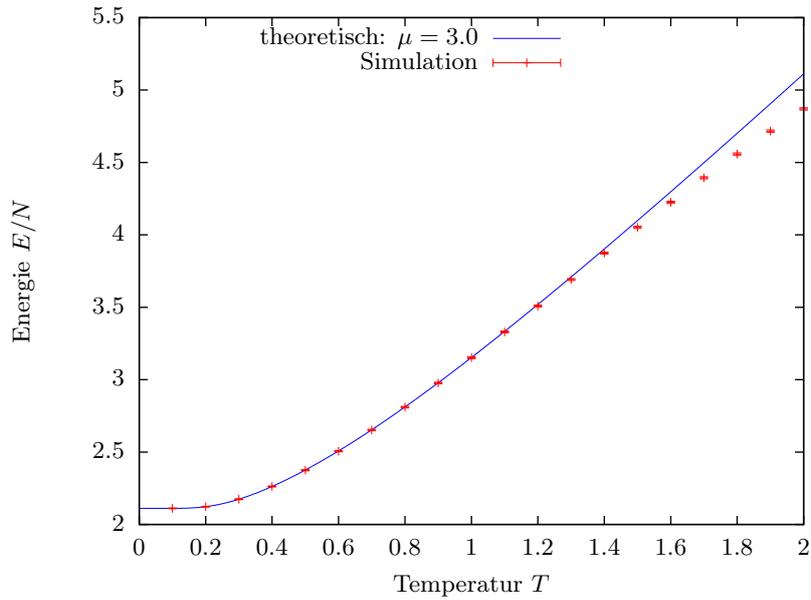


Abbildung 4.12: Ideale Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Temperatur für ein chemisches Potential  $\mu = 3,0$ . Die blaue Linie wurde theoretisch berechnet. Die roten Punkte mit Fehlerbalken stellen die Simulationsergebnisse dar.

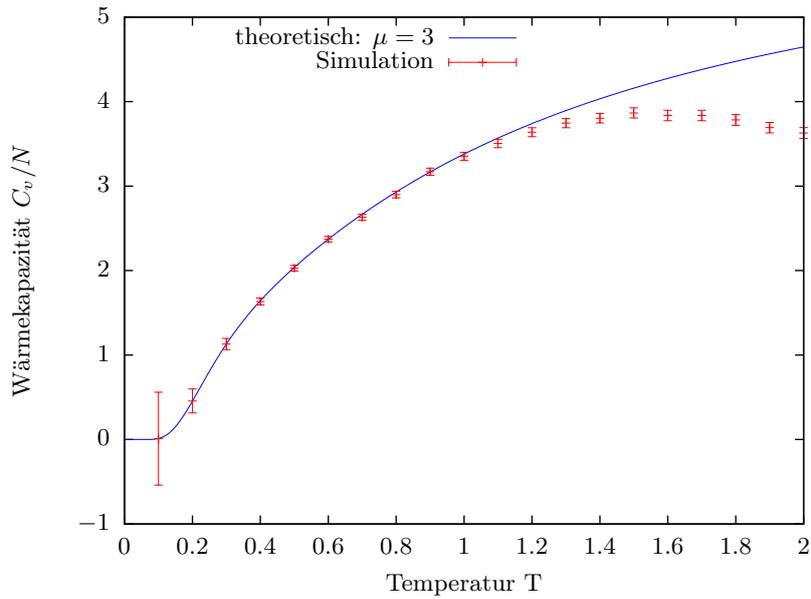


Abbildung 4.13: Ideale Wärmekapazität pro Teilchen in Abhängigkeit von der Temperatur für ein chemisches Potential  $\mu = 3,0$ . Die blaue Linie wurde theoretisch berechnet. Die roten Punkte mit Fehlerbalken stellen die Simulationsergebnisse dar.

#### 4 Ergebnisse

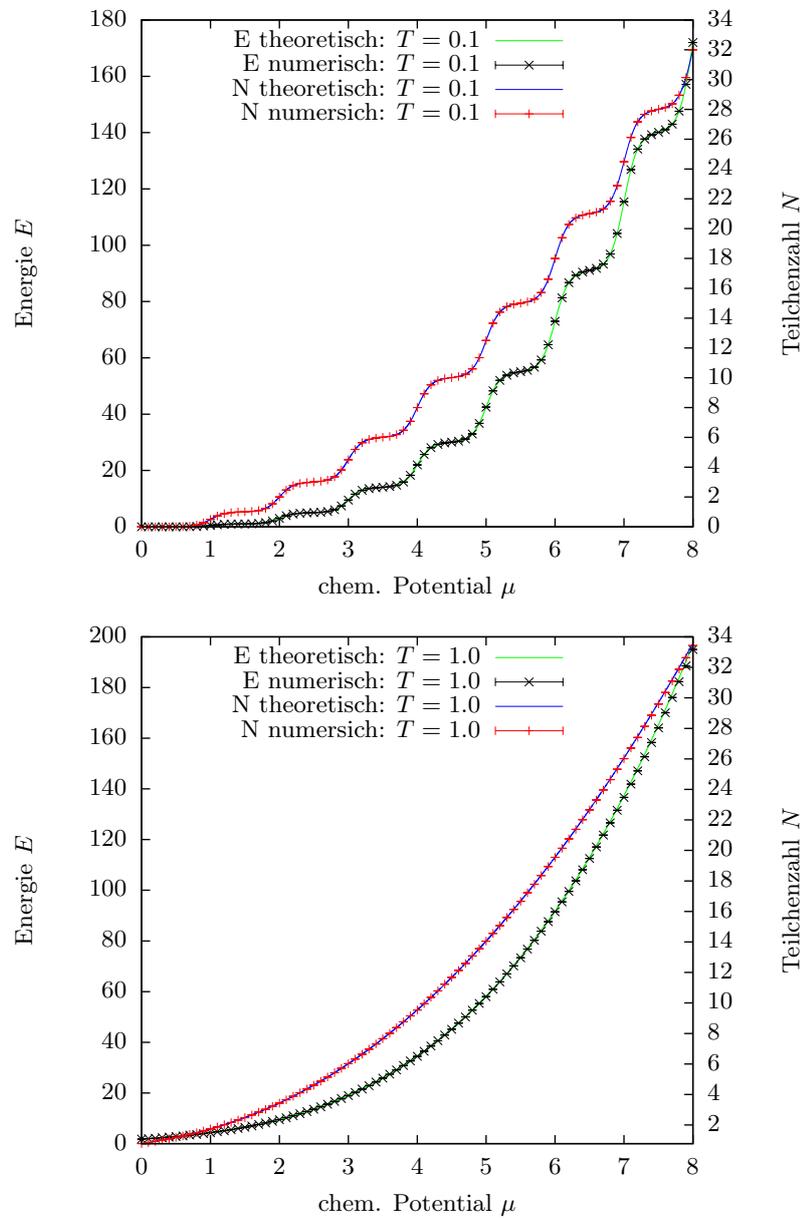


Abbildung 4.14: ideale Energie und Teilchenzahl in Abhängigkeit vom chemischen Potential bei einer Temperatur von  $T = 0,1$  (oben) und  $T = 1,0$  (unten). Die blaue und grüne Linie wurden theoretisch berechnet. Die Punkte sind die Simulationsergebnisse.

## 4.4 Ergebnisse für das wechselwirkende System

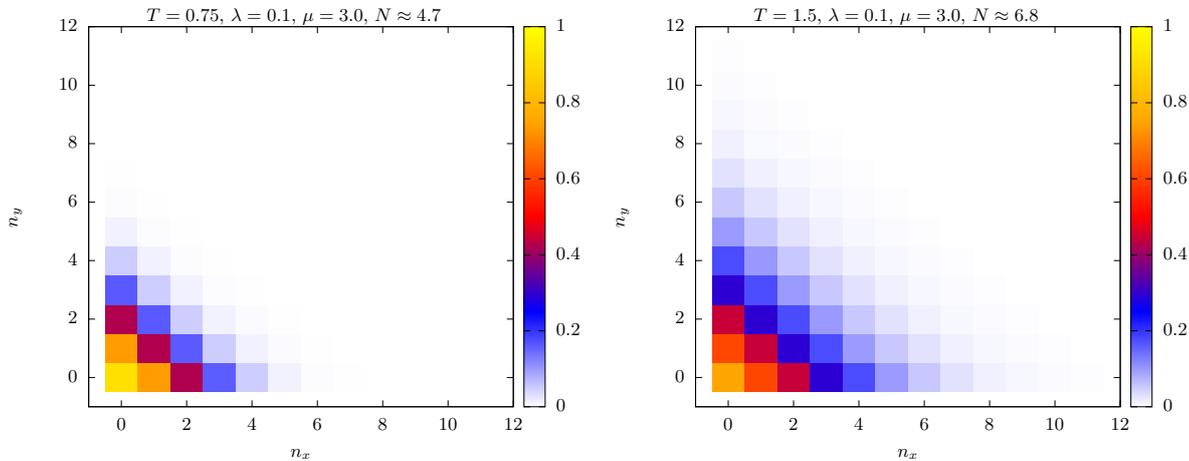


Abbildung 4.15: Mittlere Besetzung der Orbitale für die Temperaturen  $T = 0,75$  (links) und  $T = 1,5$  (rechts) bei einer Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und chemischem Potential  $\mu = 3,0$

Die Ergebnisse dieses Abschnitts wurden mit der gleichen Anzahl an Monte-Carlo-Schritten wie im letzten berechnet. Die Rechenlaufzeit beträgt je nach Teilchenzahl höchstens einige Minuten pro Datenpunkt.

Auf Grund der Basisgröße ist es mit dieser Methode nur möglich ein sehr schwach wechselwirkendes System mit Kopplungsstärken  $\lambda < 0,4$  zu simulieren. Bei stärkerer Wechselwirkung werden sofort die obersten Schalen signifikant besetzt, sodass keine Konvergenz mehr vorliegt. Selbst bei schwacher Wechselwirkung muss auch die Temperatur  $T < 1,0$  sein, da schon die Resultate für das ideale System für größere Temperaturen falsch sind. Die mittlere Besetzung der Orbitale bei einer Kopplungsstärke  $\lambda = 0,1$  und einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$  ist für zwei Temperaturen  $T = 0,75$  und  $T = 1,5$  in Abbildung 4.15 gezeigt. Auch hier sieht man, dass sehr schnell bei steigender Temperatur die höheren Niveaus besetzt werden. Aus diesem Grund habe ich mich dazu entschieden den Übergang von einem wechselwirkenden System zu einem idealen für sehr kleine Temperaturen genauer zu untersuchen.

Als erstes soll der Verlauf der Teilchenzahlen in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Kopplungsstärken diskutiert werden. Dieser ist in Abbildung 4.17 dargestellt. Für alle gezeigten Kopplungsstärken besteht der Grundzustand aus drei Teilchen. Für das ideale System stellt sich der Grundzustand jedoch bei 4,5 Teilchen ein (siehe Abbildung 4.10). Für Temperaturen  $T > 0,3$  ist der funktionale Zusammenhang für alle Kopplungen etwa gleich, nur dass für stärkere Wechselwirkung immer weniger Teilchen im System sind, was sich durch die Abstoßung sofort erklären lässt. Bei kleineren Temperaturen wird der Verlauf der Teilchenzahl für immer kleinere,

#### 4 Ergebnisse

aber nicht verschwindende  $\lambda$  zu einer Stufenfunktion, die kurz vor dem Nullpunkt von 4,5 auf 3,0 Teilchen springt. Dieses Verhalten kann wieder durch Betrachtung der Gewichte aller bei sehr tiefen Temperaturen vorkommenden Konfigurationen begründet werden. Die Exponenten der Gewichte  $W(\{n\}) = e^{-\beta(E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}})}$  für ein ideales System und für eine Kopplungsstärke  $\lambda = 0,001$  sind in Tabelle 4.16 eingetragen. Für  $\lambda = 0$  besitzen alle dort stehenden Konfigurationen das gleiche Gewicht, sodass im Mittel gerade die berechneten 4,5 Teilchen entstehen. Für ein endliches  $\lambda$  wird die Entartung aufgehoben und der Zustand mit drei Teilchen besitzt das größte Gewicht, auch wenn der Unterschied zu den anderen Konfigurationen minimal ist.

Nr.	Konfiguration	$G(0, 3)$	$G(0.001, 3)$
1	0/0 0/1 1/0	-4	-3.99812
2	0/0 0/1 1/0 0/2 [2/0]	-4	-3.99638
3	0/0 0/1 1/0 1/1	-4	-3.99644
4	0/0 0/1 1/0 0/2 1/1 [2/0]	-4	-3.996413
5	0/0 0/1 1/0 0/2 2/0	-4	-3.99411
6	0/0 0/1 1/0 0/2 1/1 2/0	-4	-3.99131

Abbildung 4.16: Exponenten der Gewichte  $G(\lambda, \mu) := E_{\{n\}}^{eff} - \mu N_{\{n\}}$  aller Konfigurationen bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$ , die für sehr kleine Temperaturen vorkommen. In der ersten Spalte steht die Nummer der Konfiguration, in der zweiten die Quantenzahlen der besetzten Orbitale, in der dritten die Exponenten des Gewichts für  $\lambda = 0$  und in der letzten für  $\lambda = 0,001$ . Der Wahrscheinlichste Übergang von Konfiguration 1 ist der zu 3 (rotes Gewicht)

Der wahrscheinlichste Übergang von dieser Konfiguration 1 ist der zu 3, denn dieser hat das nächst kleinere Gewicht. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist durch das Verhältnis der beiden Gewichte gegeben und in Abbildung 4.18 gegen die Temperatur aufgetragen. Die Übergangswahrscheinlichkeit beträgt bei  $T = 0,02$  noch über 90% und fällt dann für kleinere Temperaturen sehr stark ab. Dies erklärt somit den Verlauf der mittleren Teilchenzahl in Abbildung 4.17, denn sobald eine endliche Wechselwirkung vorliegt, ist die Differenz der Gewichte verschieden von Null und für eine nur hinreichend kleine Temperatur wird das Verhältnis der Gewichte gegen null gehen.

Die mittlere Energie für verschiedene Kopplungsstärken verläuft synchron zur mittleren Teilchenzahl, da mehr Teilchen im System für eine größere Ideal- und Wechselwirkungsenergie sorgen. Dies ist in Abbildung 4.19 und 4.20 zu sehen. Im Grundzustand unterscheiden sich die Energien natürlich leicht auf Grund der unterschiedlich starken Abstoßung bei gleicher Teilchenzahl, sodass für kleinere  $\lambda$  auch eine kleinere Grundzustandsenergie vorliegt. Bei höheren Temperaturen ist es gerade umgekehrt, da für stärkere Kopplung weniger Teilchen im System sind.

#### 4.4 Ergebnisse für das wechselwirkende System

Ein sehr interessantes Verhalten zeigt nun die Wärmekapazität für kleiner werdendes  $\lambda$ , was in den Abbildungen 4.21 und 4.22 zu sehen ist. Für endliche Kopplungsstärken besitzt die Wärmekapazität ein Maximum, welches für kleiner werdendes  $\lambda$  immer weiter zu tieferen Temperaturen wandert und dabei immer spitzer und größer wird, bis die Wärmekapazität für  $\lambda = 0,001$  scheinbar divergiert. Betrachtet man noch einmal die Definition der Wärmekapazität  $C_v := \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T} \right|_V$ , so kann der Verlauf der Wärmekapazität direkt mit dem der Energie begründet werden. Die Wärmekapazität ist gerade proportional zu der Steigung der Energie  $E(T)$  und die Lage des Maximums ist bestimmt durch den Wendepunkt von  $E(T)$ . Für das ideale System besitzt die Energie keinen Wendepunkt und damit die Wärmekapazität kein Maximum. Da auch  $E(T)$  für sehr kleine Kopplungsstärken kurz vor dem Nullpunkt zu einer Stufenfunktion wird und die Steigung in dem Punkt gegen unendlich geht, wird die Wärmekapazität in dem Punkt unendlich groß. Wie man in Abbildung 4.20 sehen kann, wird der Bereich, indem die Steigung von  $E(T)$  Null ist, immer kleiner, existiert jedoch kurz vor dem Nullpunkt, sodass diese dort Null wird. Die Wärmekapazität hat also für sehr kleine, aber endliche  $\lambda$  einen Delta-Peak kurz vor dem Nullpunkt.

Der Übergang von einem wechselwirkenden zu einem idealen System ist also für genügend kleine Temperaturen nicht stetig, denn das Verhalten des Systems ändert sich schlagartig auf Grund der Aufhebung der Entartung. Für größere Temperaturen ist der Übergang allerdings stetig. Wenn es ein chemisches Potential gibt, für das sich die Grundzustände im idealen und nicht idealen System nicht unterscheiden, so würde der Übergang natürlich für alle Temperaturen stetig sein.

Zum Schluss soll noch ein anderer Ausdruck für die Wärmekapazität, der in Abschnitt 2.5.1 gegeben wurde, betrachtet werden:

$$C_V = \frac{1}{T^2} \left[ \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle + \mu \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{N} \rangle - \mu \langle \hat{H} \hat{N} \rangle \right] \quad (4.4.1)$$

Am Nullpunkt verschwindet sowohl die simulierte wie auch die theoretisch berechnete Wärmekapazität des idealen Systems, sodass man schreiben kann:

$$\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle = \mu \left( \langle \hat{H} \hat{N} \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{N} \rangle \right)$$

Da die Gewichte der Konfigurationen in Tabelle 4.16 alle gleich sind, werden alle im Grundzustand realisiert und somit verschwindet die Energiefluktuation am Nullpunkt nicht:  $\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle \neq 0$ . Damit die Wärmekapazität verschwindet, muss die „Kreuzkorrelation“ von Teilchenzahl und Energie, multipliziert mit dem chemischen Potential, gerade die Energiefluktuation kompensieren. Bei dem Gedankengang muss natürlich vorausgesetzt werden, dass die Klammer auf der rechten Seite von 4.4.1 schneller verschwindet als  $\frac{1}{T^2}$ . Aber da  $C_V(T) = 0$  ist, muss dies gegeben sein.

Für den Fall einer endlichen Wechselwirkung kommt im Grundzustand nur genau eine Konfiguration vor. Also verschwindet die Fluktuation der Energie im Grundzustand. Mit  $C_V(T) = 0$  muss also auch die „Kreuzkorrelation“ verschwinden.

#### 4 *Ergebnisse*

Im großkanonischen Ensemble sind also grundsätzlich Fluktuationen der Energie am Nullpunkt erlaubt, jedoch verschwindet stets die Wärmekapazität. Im Gegensatz dazu ist die Fluktuation der Energie im kanonischen Ensemble bei fixierter Teilchenzahl im Grundzustand immer Null, sodass die Wärmekapazität dort verschwindet.

#### 4.4 Ergebnisse für das wechselwirkende System

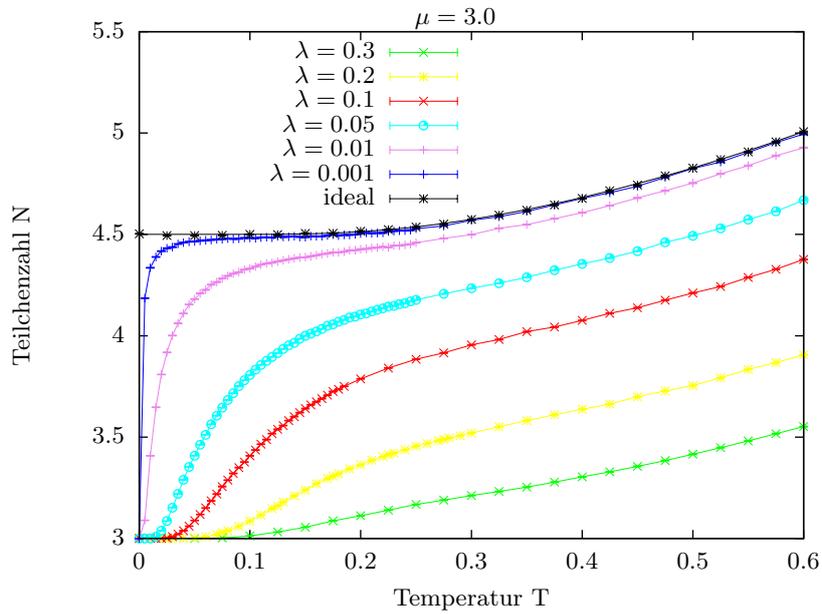


Abbildung 4.17: Mittlere Teilchenzahl in Abhängigkeit von der Temperatur bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$  für verschiedene Kopplungsstärken

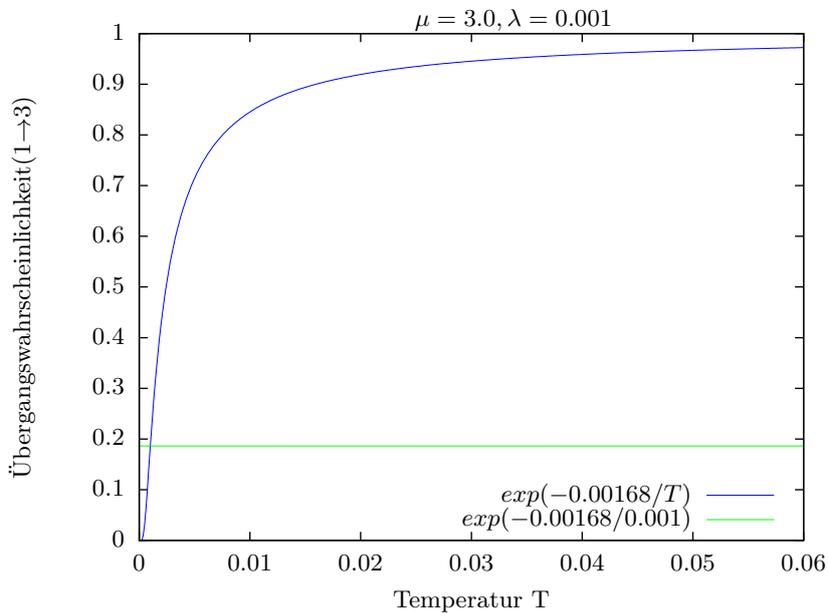


Abbildung 4.18: Übergangswahrscheinlichkeit für  $\mu = 3,0$  und  $\lambda = 0,001$  von Konfiguration 1 aus Tabelle 4.16 zu Konfiguration 3 in Abhängigkeit von der Temperatur

#### 4 Ergebnisse

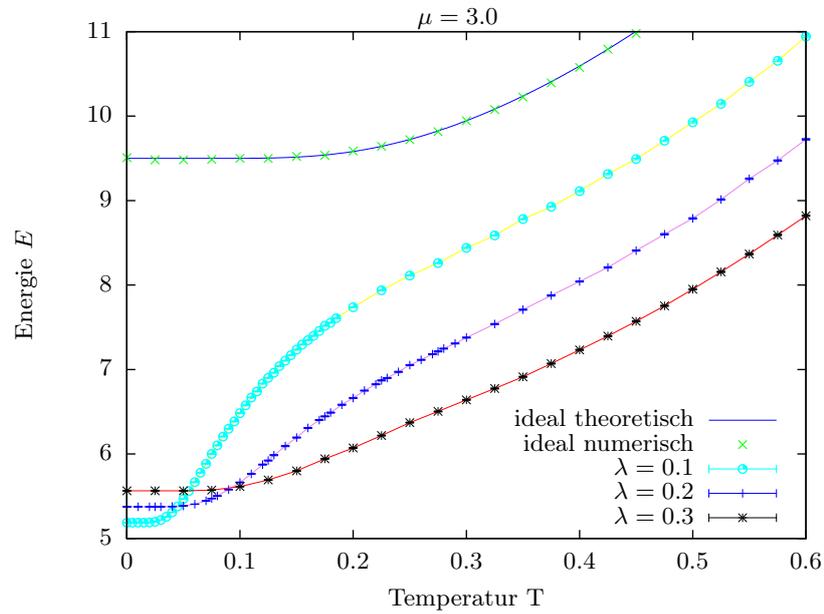


Abbildung 4.19: Mittlere Energie in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Kopplungsstärken bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$

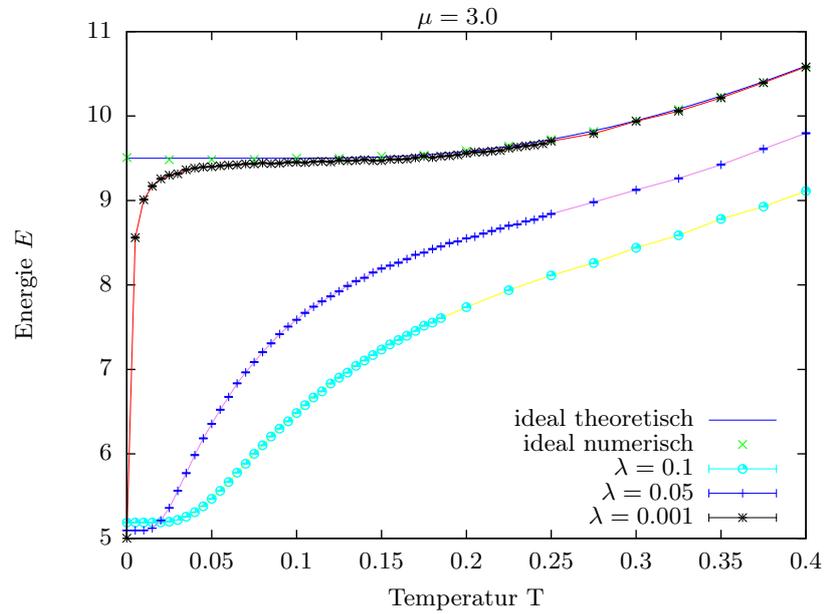


Abbildung 4.20: Mittlere Energie in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Kopplungsstärken bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$

#### 4.4 Ergebnisse für das wechselwirkende System

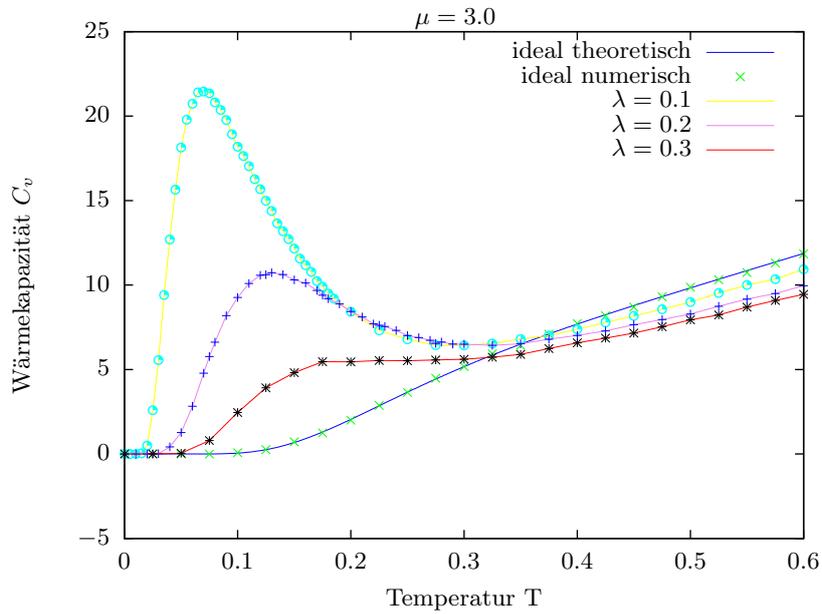


Abbildung 4.21: Wärmekapazität in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Kopplungsstärken bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$

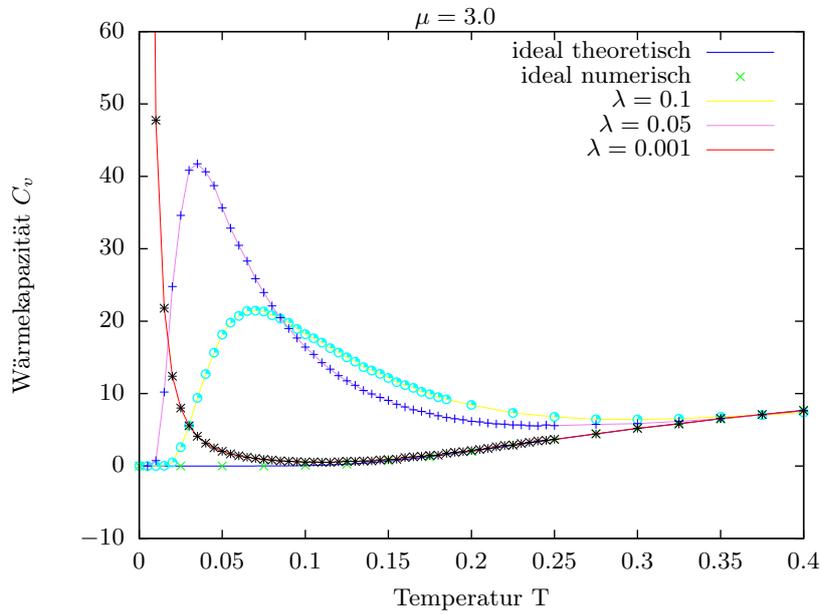


Abbildung 4.22: Wärmekapazität in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Kopplungsstärken bei einem chemischen Potential  $\mu = 3,0$



## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Das primäre Ziel dieser Arbeit bestand darin, das Verhalten der Methode des Quanten-Monte-Carlo in Besetzungszahldarstellung in zwei Dimensionen zu untersuchen. Dazu wurde im dritten Kapitel ein minimaler Satz von Monte-Carlo-Schritten gefunden, der für das verwendete Testsystem ausreicht, um die Ergodizitätsbedingung zu erfüllen und mit dem innerhalb des Formalismus einer Diagonalnäherung richtige Erwartungswerte berechnet werden können. Überträgt man diese Schritte in das kanonische Ensemble, in dem die exakte Rechnung ([4]) durchgeführt wird, so sind dies die gleichen. Nur bei sehr kleinen Temperaturen wird eine zusätzliche Symmetrisierung der Besetzungszahlen notwendig. Ein wichtiges Ergebnis ist also, dass die exakte Rechnung ohne Veränderungen auch in zwei Dimensionen benutzt werden kann.

Es bleibt jedoch die Frage offen, ob bei der Verwendung einer größeren Basis oder bei dreidimensionalen Systemen weitere Schritte nötig sind. Meine Vermutung ist, dass in drei Dimensionen auf Grund anderer Symmetrien und Entartungen der Basisfunktionen in kartesischen Koordinaten neue Schritte benötigt werden.

Eine mögliche Verbesserung der Methode könnte deshalb durch die Verwendung von radialsymmetrischen Basisfunktionen gegeben sein, da das harmonische Fallpotential diese Symmetrie besitzt und erst durch die kartesische Basis eine andere Symmetrie eingeführt wird.

Bezüglich der Methode einer Diagonalnäherung hat sich in dieser Arbeit ergeben, dass die verwendete Basis nur für ein schwach wechselwirkendes Testsystem bei sehr kleinen Temperaturen konvergiert. Um größere Parameter zu simulieren wäre vermutlich eine extrem große kartesische Basis nötig. Auch dieses Problem könnte durch eine radialsymmetrische Basis, die möglicherweise ein besseres Konvergenzverhalten aufweist, behoben werden.

Ein Vergleich zwischen Quanten-Monte-Carlo mit Diagonalnäherung und der exakten Rechnung sowie mit anderen Verfahren unter Benutzung verschiedener Basen steht noch aus und wird Gegenstand anschließender Arbeiten sein.

Die Untersuchung des Übergangs eines schwach wechselwirkenden Testsystems zu einem idealen hat gezeigt, dass dieser nur für größere Temperaturen stetig ist. Für hinreichend kleine Temperaturen scheint die Wärmekapazität für beliebig schwache Kopplung und Temperatur einen Delta-Peak zu besitzen. Dieses Verhalten könnte ein Phasenübergang des Systems bedeuten, bei dem die Wärmekapazität auch an einem Punkt divergiert. Ob das Testsystem das gleiche Verhalten bei einer exakten Rechnung aufweist, bleibt zu untersuchen.



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Wärmebad . . . . .	9
4.1	nicht symmetrische Grundzustände . . . . .	27
4.2	symmetrische Grundzustände . . . . .	29
4.3	Vergleich der Grundzustände für 1-T- und 6-T-Schritt . . . . .	30
4.4	Gewichte für $\mu = 12,2$ und $\lambda = 0,1$ . . . . .	30
4.5	Vergleich der Grundzustände für 1-T- und 6-T-Schritt . . . . .	31
4.6	Gewichte für $\mu = 10,8$ und $\lambda = 0,1$ . . . . .	31
4.7	Aufbau 5. Schale . . . . .	34
4.8	Aufbau 5. Schale . . . . .	35
4.9	Aufbau 5. Schale . . . . .	36
4.10	zweidimensionale Fermiverteilung . . . . .	37
4.11	zweidimensionale Fermiverteilung . . . . .	38
4.12	ideale Energie in Abhängigkeit von der Temperatur . . . . .	41
4.13	Ideale Wärmekapazität in Abhängigkeit von der Temperatur . . . . .	41
4.14	ideale Energie und Teilchenzahl in Abh. vom chemischen Potential . . . . .	42
4.15	Besetzung mit WW bei höheren Temperaturen . . . . .	43
4.16	Gewichte der Konfigurationen ideal und nicht ideal . . . . .	44
4.17	mittl. Teilchenzahl für verschiedene Kopplungsstärken . . . . .	47
4.18	Übergangswahrscheinlichkeit für $\mu = 3,0$ und $\lambda = 0,001$ von Konfiguration 1 aus Tabelle 4.16 zu Konfiguration 3 in Abhängigkeit von der Temperatur . . . . .	47
4.19	Mittlere Energie für verschiedene Kopplungsstärken . . . . .	48
4.20	Mittlere Energie für verschiedene Kopplungsstärken . . . . .	48
4.21	Wärmekapazität für verschiedene Kopplungsstärken . . . . .	49
4.22	Wärmekapazität für verschiedene Kopplungsstärken . . . . .	49



# Literaturverzeichnis

- [1] D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279 (1995).
- [2] A. Filinov, N. V. Prokof'ev, and M. Bonitz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 070401 (2010).
- [3] *Introduction to Computational Methods in Many Body Physics*, edited by M. Bonitz and D. Semkat (Rinton Press Inc, 2006).
- [4] T. Schoof, *Thermodynamische Eigenschaften entarteter, korrelierte Fermionen*, Diplomarbeit, Universität Kiel (2011).
- [5] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2006).
- [6] F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I): Eine Einführung*, 7th ed. (Springer, Berlin, 2007).
- [7] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)*, 5th ed. (Springer, Berlin, 2008).



# Erklärung

Die vorliegende Arbeit ist von mir selbständig und ausschließlich unter Zuhilfenahme der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt worden.

Kiel, den

(Ort)

(Datum)

(Unterschrift)